

UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID

Doctorado en Ingeniería Eléctrica, Electrónica y Automática



TESIS DOCTORAL

**TELEDETECCIÓN DE GASES MEDIANTE IMAGEN
HIPERESPECTRAL POR TRANSFORMADA DE FOURIER EN
EL INFRARROJO MEDIO**

**UNA CONTRIBUCIÓN AL PROBLEMA DE LA CUANTIFICACIÓN Y LA
REDUCCIÓN DE LA DIMENSIONALIDAD**

**AUTOR: MIGUEL ÁNGEL RODRÍGUEZ CONEJO
DIRECTOR: Dr. JUAN MELÉNDEZ SÁNCHEZ**

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Leganés, 2016



TESIS DOCTORAL

**Teledetección de gases mediante imagen hiperespectral por
transformada de Fourier en el infrarrojo medio**
Una contribución al problema de la cuantificación y la reducción de la dimensionalidad

Autor: Miguel Ángel Rodríguez Conejo

Director: Dr. Juan Meléndez Sánchez (Dpto. de Física)

Tutor: Dr. José Manuel Sánchez Pena (Dpto. de Tecnología Electrónica)

Firma del Tribunal Calificador:

Firma

Presidente: Dr. Eusebio Bernabéu Martínez

Vocal: Dr. Joaquín Campos Acosta

Secretario: Dr. Antonio J. de Castro González

Calificación:

Leganés, 28 de octubre de 2016

A mis padres

A Vanesa

Agradecimientos

Quiero comenzar expresando mi más sincera muestra de gratitud, admiración y respeto hacia mi director de tesis, el **Dr. Juan Meléndez Sánchez**. Siempre me consideraré en deuda con quien supo inculcar, a tan torpe aprendiz, la curiosidad y el espíritu científico, la pasión por conocer -avanzar un paso más allá-, la rigurosidad y la capacidad de auto-crítica. Me resulta difícil encontrar un mejor exponente de los valores que en este ámbito tanto debieran estimularse; sobra decir que sin sus continuas aportaciones nada de lo que sigue habría tenido lugar.

Vaya también por delante mi reconocimiento al **Dr. Fernando López Martínez**, tanto por su confianza, comprensión y dedicación, como por brindarme la oportunidad de introducir mis pasos en este, el mundo de la investigación, por el que recién transito. Las muchas lecciones aprendidas durante este tiempo me convierten en acreedor de su vasto legado.

Las próximas páginas suponen la culminación de un viaje que comenzó hace ya demasiado tiempo, en el que podría remontarme hasta mis padres, que me dieron todo; aquellos primeros profesores, que tanto y tan necesariamente me influyeron; la ilusión del primer día de Universidad, inigualables momentos y compañeros de viaje de *alto postín*. Basta con decir que recapitular nunca ha sido tan emocionante como necesario se torna ahora.

Sin embargo, recorrer este camino no habría sido posible sin haber sacrificado el tan valioso tiempo de precisamente aquellos que de más motivación me han nutrido. Vanesa, familiares y amigos, sólo pienso en la forma de recompensar mis reiteradas ausencias.

Como no podía ser de otra forma, guardo un cariño especial para todos los miembros de la familia del Laboratorio de Infrarrojos de la Universidad Carlos III de Madrid, *el LIR*, de donde siempre me he sentido parte. A aquellos que en un inicio tuvieron a bien acogirme (Felipe, Fran, José Manuel, Antonio, Susana, Leti, Lucía, Samuel e Isa), con los que disfruté aprendiendo y descubriendo (Andrés, Celeste, Alberto, Hugo, Sergio, Amelia, Irene, María, Rodrigo y Víctor), y a los que me han soportado durante esta última etapa (Guillermo, Mario, David y Raquel).

Finalmente, mi agradecimiento al Dr. José Manuel Sánchez Pena, por su plena disposición y por su desinteresada ayuda y colaboración.

A todos, simplemente, gracias.

Resumen

A lo largo de las últimas dos décadas, el desarrollo de *sistemas de imagen infrarroja* ha experimentado una notable evolución. Esta tecnología, aunque originaria del ámbito militar y de la teledetección, actualmente supone un claro ejemplo de transversalidad tras haberse trasladado con éxito a sectores como el industrial, el medioambiental, o la imagen médica, conforme su nivel de competitividad y prestaciones iban en aumento. Nuevas aplicaciones han demandado dispositivos cada vez más complejos, dotados de mecanismos de selección espectral cada vez más sofisticados, y dando lugar a sistemas de imagen con capacidad para un número reducido de canales. Recientemente, este progreso culmina con los *sistemas de imagen hiperspectral*, que aúnan las posibilidades que brinda la resolución espacial con una resolución espectral equiparable a la de los espectrorradiómetros clásicos; lo que justifica el nombre de *espectrorradiómetro de imagen* aplicado también a estos equipos.

El potencial ofrecido por estos últimos desarrollos permite afrontar bajo nuevos enfoques desafíos tradicionalmente complejos, como es el caso de la teledetección de compuestos gaseosos. Muchas aplicaciones de carácter tanto civil (como la monitorización de fuentes de contaminantes, la detección de emisiones fugitivas o el control de procesos industriales) como militar (desde la detección e identificación de agentes químicos a labores de reconocimiento de amenazas) se beneficiarán de los logros alcanzados en la resolución de este problema. En particular, una de las tareas más exigentes es la cuantificación, esto es, la estimación de parámetros físicos relevantes, como la concentración de una determinada especie química o la temperatura a la que se encuentra. Esto se debe fundamentalmente a la baja determinación de los datos observados, donde hay fuertes relaciones de acoplamiento entre magnitudes, lo que obliga al uso de complejos algoritmos para su recuperación.

Esta tesis doctoral aborda el problema de la cuantificación a distancia de gases mediante un espectrorradiómetro de imagen provisto de un interferómetro de Michelson, que le confiere una resolución espectral de $0,25\text{ cm}^{-1}$, acoplado a un array de 320×256 detectores de InSb con sensibilidad en la región comprendida entre $1,5$ y $5,5\text{ }\mu\text{m}$. Nuestro estudio comienza con el análisis de una aplicación preliminar, la teledetección activa de gases mediante sensores de banda integrada, que nos sirve para introducir herramientas como el modelado de la transferencia radiativa o la simulación de prestaciones radiométricas. El trabajo continúa con el desarrollo de las funciones de procesamiento que permiten obtener espectros a partir de interferogramas en el sistema de imagen hiperspectral utilizado. A continuación, se propone una metodología que permite la recuperación de la densidad de columna (producto de la concentración y el camino óptico) y de la temperatura mediante un algoritmo de ajuste iterativo, resolviendo la relación de ambigüedad que estas variables mantienen, y que finalmente es validada de forma experimental a partir de espectros de transmitancia.

Nuestro enfoque del problema de la cuantificación trabaja con un espectro de alta resolución para cada píxel de la imagen. Esto supone un volumen de datos sumamente grande, y consecuentemente, unos tiempos de cómputo muy elevados, lo que nos ha llevado a la búsqueda de procedimientos que permitan extraer la dimensionalidad intrínseca de la información contenida en dichos datos. La solución propuesta hace uso del análisis de componentes principales como técnica para generar sub-espacios adaptados a los espectros medidos, aunque con la particularidad de que dichas componentes se construyen a partir de datos teóricos que simulan el escenario observado. De esta forma se consigue no sólo una notable reducción de la dimensionalidad y la multicolinealidad, sino que ésta viene acompañada por una reducción del ruido, y se facilita la recuperación de las variables densidad de columna y temperatura. Esta nueva estrategia de estimación es validada a partir del caso experimental estudiado inicialmente, y se complementa su uso junto a distintas estrategias de generalización, que buscan optimizar la recuperación de datos explorando diferentes alternativas de aproximación de funciones (como el perceptrón multicapa) y de regresión no lineal (mediante redes neuronales de base radial y máquinas de vectores de soporte). Otro de los factores responsables del alto volumen de datos presente en los interferogramas es el sobremuestreo con el que son adquiridos, por lo que aquí se propone un algoritmo que consigue un uso eficiente de las muestras redundantes para reducir el nivel de ruido.

Por último, esta tesis concluye poniendo a prueba los planteamientos expuestos hasta aquí para afrontar un problema metrológico actual, como es la medida de las altas temperaturas (>2400 K) que se producen en determinados procesos de combustión, en el contexto de un proyecto europeo de investigación. Nuestra aportación se basa en el uso de técnicas de espectroscopia de emisión, junto al de una metodología de recuperación de la temperatura basada en el método de ajuste iterativo ya desarrollado, obteniéndose como sub-productos estimaciones de la densidad de columna de las principales especies. No obstante, este proceso no resulta libre de contratiempos, principalmente por la dificultad que implica observar fenómenos dinámicos con un interferómetro de Michelson, en el que la radiación entrante fluctúa temporalmente durante el recorrido del espejo. Esto provoca una superposición entre la modulación propia del interferómetro y la modulación temporal, que ha sido necesario corregir para evitar la aparición de artefactos en los espectros obtenidos. Finalmente, el análisis de las medidas realizadas mediante el método de Monte Carlo arroja niveles de incertidumbre en la estimación de la temperatura del orden de ± 5 K.

Abstract

During the last two decades, the development of *infrared imaging systems* has experienced a remarkable evolution. This technology, although primarily originated in military and remote sensing fields, currently has become an example of transversality once it has been successfully transferred to other sectors, like industry, environment, or healthcare, while both its competitiveness and performance followed a growing trend. New applications have required new and more complex devices, including mechanisms for spectral selection that become increasingly more sophisticated, and give rise to imaging systems able to sense along a reduced number of channels. Recently, this progress has culminated with the development of the so-called *hyperspectral imaging systems*, equipped with a spectral resolution comparable to that provided by classic spectroradiometers, whilst maintaining all the possibilities that spatial resolution grants. That is the reason why they are often referred to as *imaging spectroradiometers*.

The potential offered by these developments allows to address old challenges through new perspectives, as it is the case of remote sensing of gases. Many applications both civil (as the case of pollutants emissions monitoring, fugitive emissions detection or industrial processes) and military (from detection and identification of chemical agents to threat recognition) will benefit from advances performed in this topic. In particular, one of the most demanding tasks is quantification, that is, the estimation of relevant physical parameters, as the concentration of a chemical compound or its temperature. This is mainly due to the fact that the targeted data are poorly determined, because of coupling relations between magnitudes, and it motivates the use of complex algorithms in the retrieval procedures.

This dissertation faces the problem of gas remote quantification through the use of an imaging Fourier transform spectrometer (IFTS), fitted with a Michelson interferometer that provides a maximum spectral resolution of $0,25\text{ cm}^{-1}$, and coupled to a 320×256 InSb array of detectors operating in the mid-infrared range, from $1,5$ to $5,5\text{ }\mu\text{m}$. Our analysis begins with a preliminar application, the active remote sensing of gases based on single band infrared imaging detectors. This stage will helps us to introduce some important tools, like modelling of radiative transfer functions, and the ability to perform radiometric simulations. Our work continues with the setup of our hyperspectral imaging system, and the development of processing functions that allow to obtain spectra from interferograms. Then, a full methodology has been proposed for both column density (the product of concentration and optical path) and temperature retrieval, through an iterative fitting algorithm that solves the ambiguity between these variables. Finally, it has been experimentally validated making use of transmittance spectra.

Our approach to the quantification problem requires of high resolution spectra for each pixel in the image. This implies a huge volume of data, and consequently, very large computing times. This has lead us to the search of procedures for extracting the intrinsic

dimensionality of the information contained in data. Our solution is based on the use of principal component analysis to build signal sub-spaces adapted to measured spectra, but with the distinctive feature that they are generated from theoretical datasets that simulate the target scene. Therefore, not only a notable dimensionality and multicollinearity reduction is achieved, but also noise levels are decreased, making easier to retrieve column density and temperature. This methodology is also validated for the experimental setup previously considered, and it is jointly applied with different generalization strategies, that aim to optimize data retrieval exploring different approaches like function approximation (with a multilayer perceptron) and non linear regression techniques (through radial basis neural networks and support vector machines). Another important factor responsible for the great volume of interferograms is oversampling. In that case, an algorithm is proposed to squeeze the redundant samples, so that they are rearranged to reduce noise and promote a more efficient use.

This thesis concludes testing all the exposed work by dealing with a metrology topic of current interest: the accurate measurement of high temperatures (>2400 K) in combustion processes, in the context of a European research project. Our approach is based on the use of emission spectroscopy techniques along with a temperature retrieval methodology, that also provides column density estimations of major species. However, this is not a straightforward procedure, mainly due to the difficulties that entails to observe dynamic phenomena with a Michelson interferometer, in which the collected radiation temporarily fluctuates during mirror's sweep. This causes a superposition between both interferometer modulation and external modulation, that has been corrected to avoid artifacts in the associated spectra. Finally, the Monte Carlo method applied to measurements reveals an uncertainty in the estimation of temperature of about ± 5 K.

Índice general

Resumen	III
Abstract	V
Índice	VII
1. Motivación e hipótesis de trabajo	1
1.1. Objetivos e hipótesis de trabajo	3
1.2. Metodología y estructura de la tesis doctoral	6
I Teledetección de gases mediante imagen infrarroja	9
2. Fundamentos físicos e introducción a la tecnología infrarroja	11
2.1. La región infrarroja del espectro EM	12
2.2. Introducción a la radiometría	14
2.2.1. Magnitudes radiométricas: la radiancia	14
2.2.2. Absortancia, reflectancia y transmitancia	14
2.2.3. Leyes fundamentales de radiación en el infrarrojo	15
2.3. Ley de Bouguer-Lambert-Beer. Ecuación de transferencia radiativa	18
2.3.1. Ley de Bouguer-Lambert-Beer	18
2.3.2. Ecuación de transferencia radiativa	18
2.3.3. Influencia de la temperatura en el coeficiente de absorción	20
2.4. Sistemas de imagen infrarroja	21
2.4.1. Detectores infrarrojos	24
2.4.2. Figuras de mérito	25
2.4.3. Los sistemas de imagen como sensores de radiancia	29
2.4.4. Termografía infrarroja	31
2.5. Teledetección de gases	31
2.5.1. Modelo radiométrico	31
2.5.2. Método de emisión-transmisión	34
2.5.3. Aproximaciones: casos de emisión y absorción	35
2.5.4. El problema de la recuperación de Q y T	36
3. Teledetección activa de gases	39
3.1. Detección de gases en entornos industriales	40
3.1.1. Sistemas in-situ	41
3.1.2. Sistemas de teledetección	41

3.1.3. Teledetección de gases mediante imagen IR	42
3.2. Modelos radiométricos	42
3.2.1. Caso de detección pasiva	43
3.2.2. Caso de detección activa	44
3.2.3. Concentración mínima detectable	46
3.2.4. Simulación de escenarios radiométricos	49
3.3. Validación experimental	53
3.3.1. Fugas de dióxido de carbono en una tubería	53
3.3.2. Aplicación industrial: análisis de estanqueidad	54
 II Imagen hiperespectral en el infrarrojo medio mediante transformada de Fourier	59
 4. Imagen hiperespectral mediante espectrometría FTIR	61
4.1. Espectroscopía FTIR: interferómetro de Michelson	62
4.1.1. Fuentes de luz monocromática	63
4.1.2. Fuentes de luz policromática	65
4.1.3. Parámetros de interés	66
4.2. Espectros a partir de interferogramas	68
4.2.1. Simetrización	69
4.2.2. Apodización	70
4.2.3. Inserción de ceros o padding	73
4.2.4. Corrección de fase	74
4.2.4.1. Método de Mertz	76
4.2.4.2. Método de Forman	78
4.3. Imagen hiperespectral en el infrarrojo medio	79
4.3.1. El concepto de imagen hiperespectral	80
4.3.2. Sistema Telops FIRST-MW	81
4.3.3. Corrección del eje óptico	84
4.4. Secuencia de procesado en FIRST-MW	85
4.4.1. Calibración en unidades de radiancia	87
 5. Cuantificación de gases mediante imagen hiperespectral	91
5.1. Análisis introductorio	92
5.2. Efectos del equipo de medida	94
5.3. Modelo radiométrico	95
5.3.1. Modo activo o de absorción	95
5.3.2. Caso general	96
5.3.3. Síntesis espectral de LBLRTM	97
5.3.4. Efectos instrumentales en simulaciones de LBLRTM	99
5.4. Método iterativo para la recuperación de Q/T	102
5.5. Experimento de validación	104
5.5.1. Descripción de la configuración de medida	104
5.5.2. Región espectral de ajuste	106

5.5.3. Análisis de los resultados	106
5.5.4. Estimación de errores en la recuperación de Q/T	110
5.6. Aplicación: combustiones de vehículos	111
5.7. Conclusiones	114
III Reducción de la complejidad y uso eficiente de la información	117
6. Reducción de la dimensionalidad y modelos de regresión	119
6.1. El problema de la alta dimensionalidad	120
6.2. Aplicación en imágenes hiperespectrales	121
6.2.1. Proyección en sub-espacios de señal. Análisis por Componentes Principales	122
6.2.2. Recuperación de Q y T mediante CPs: planteamiento	124
6.2.3. Recuperación de Q y T mediante CPs: resultados	125
6.3. En busca de la generalización. Aproximación de funciones y regresión . . .	130
6.3.1. Redes Neuronales para aproximación de funciones	130
6.3.2. Regresión no lineal múltiple	132
6.3.2.1. Regresión mediante Redes Neuronales (GRNN)	133
6.3.3. Regresión mediante Vectores de Soporte (SVR)	135
6.3.3.1. Desarrollo en Vectores de Soporte	137
6.3.3.2. Aplicación de SVR para la regresión de Q y T	138
6.4. Análisis comparativo	140
7. Uso eficiente de la información: algoritmo de recombinación de muestras	143
7.1. Análisis introductorio	144
7.2. Teoría de muestreo en sistemas FTIR	146
7.2.1. Sobremuestreo y diezmado	147
7.3. Algoritmo de recombinación de muestras	149
7.3.1. Simulaciones	151
7.4. Aplicación en casos experimentales	156
IV Aplicación al campo de la metrología	159
8. Medida de la temperatura en procesos de combustión	161
8.1. Estrategia de medida: espectroscopia de emisión FTIR	163
8.2. Metodología de recuperación de la temperatura	165
8.2.1. Modelado de coeficientes de absorción a alta temperatura	166
8.2.2. Calibración radiométrica de llamas	167
8.2.3. Filtrado de ruido mediante componentes principales	169
8.2.4. Inestabilidad temporal: <i>flickering</i> y fluctuaciones de alta frecuencia .	170

9. Corrección de fluctuaciones temporales en espectrometría FTIR	175
9.1. Análisis introductorio	175
9.2. Corrección de las fluctuaciones temporales en espectrometría FTIR	176
9.3. Simulación y análisis de un caso práctico	179
9.4. Aplicación: medida de combustiones mediante espectroscopia FTIR	182
9.5. Hipótesis y consideraciones	187
10. Recuperación de la temperatura en llamas: resultados experimentales	191
10.1. Adaptación del equipo de medida	191
10.2. Descripción de la campaña de medidas	192
10.3. Recuperación de mapas de temperatura y cantidad de gas	194
10.4. Análisis de incertidumbre	196
V Conclusiones	203
11. Análisis de resultados	205
Lista de contribuciones	209
Bibliografía	211

Índice de figuras

1.1. Diagrama de Venn en el que se introduce esta tesis doctoral como la intersección de diferentes disciplinas.	5
2.1. Clasificación de las principales regiones de espectro electromagnético, atendiendo a su longitud de onda, y ubicación de la región infrarroja.	12
2.2. Transmitancia atmosférica en función de la longitud de onda, de 1 a 14 μm , donde pueden distinguirse las regiones NIR, SWIR, MIR y TIR. Se ha empleado el modelo atmosférico denominado <i>Mean Latitude Summer</i> (MLS), correspondiente a una distancia de 1 kilómetro y temperatura ambiente de 296K.	13
2.3. Ejemplo de la distribución espectral de distintas radiancias de cuerpo negro a diferentes temperatura.	17
2.4. Representación gráfica de la absorción de un medio modelada a partir de la ley de Beer-Lambert.	19
2.5. Ejemplo de influencia de la temperatura en la absorptividad, para el caso del CO_2 . La absorptividad tiene como dimensión física la inversa de la longitud siempre y cuando la concentración se mida como fracción molar.	22
2.6. Esquema de detección, a modo de diagrama de bloques, con los principales elementos de un sistema de imagen infrarroja: sensor, óptica, electrónica de acondicionamiento, etc.	22
2.7. Ejemplos de detectores infrarrojos en formato FPA, para las regiones del infrarrojo medio y SWIR, respectivamente. Ilustración adaptada de [25]. . .	25
2.8. Detectividad específica en función de la longitud de onda para distintos tipos de materiales detectores. Ilustración adaptada de [139].	27
2.9. Determinación experimental de la MTF para un sistema óptico de gran complejidad, formado por la concatenación de un telescopio Cassegrain (3.5x), un sistema de aumentos 2.5x y una lente de distancia focal 100 mm. .	28
2.10. Esquema simplificado para la comprobación de la invariancia de la radiancia y para la obtención de la expresión de la irradiancia en cada punto del plano imagen a partir de la radiancia de la fuente.	30
2.11. Modelo radiométrico característico en problemas de teledetección de gases con sistemas de imagen infrarroja.	32
3.1. Esquema de detección de gases pasivo, considerando un fondo con las propiedades de cuerpo negro y sin fuentes de iluminación externas.	43

3.2.	Estimación de la densidad de columna mínima detectable para la detección pasiva de metano en el infrarrojo medio, frente a un <i>background</i> de temperatura 296 K.	45
3.3.	Esquema de detección de gases activo, considerándose en este caso la emisividad del fondo como un cuerpo gris e iluminación externa.	46
3.4.	Representación del término de señal (definido como $\Delta\mathcal{L} \equiv \mathcal{L}_g - \mathcal{L}_{ref} $) frente a la concentración de CH_4 , para tres temperaturas de fondo diferentes; mientras que la temperatura del gas permanece constante a $T_g = 280K$ y la radiancia equivalente de ruido indica el límite de detección. La figura superior no presenta iluminación externa, por lo que para $T_b = 280K$ la ausencia de contraste térmico convierte al gas en indetectable. La gráfica inferior representa el uso de iluminación externa, donde el gas puede detectarse a concentraciones menores que en el caso anterior e independientemente de la temperatura del fondo.	48
3.5.	Concentración mínima detectable correspondiente a un volumen de metano de camino óptico igual a 10 cm, en función del ángulo de incidencia sobre el background.	50
3.6.	(Superior) Imagen sintética de la radiancia \mathcal{L}_{off} , correspondiente al modo pasivo. Se distinguen 5 regiones horizontales, con temperaturas de fondo $T_b = 250, 270, 280, 290$ y 310 K (de arriba hacia abajo). Una nube de CH_4 , uniforme en la dimensión vertical, con un camino óptico de $l = 10cm$, y con una distribución gaussiana de la concentración en la dirección horizontal. (Inferior) Se muestran los perfiles de radiancia obtenidos para tres temperaturas de fondo diferentes, donde las líneas continuas representan los valores libres de ruido experimental.	51
3.7.	(Superior) Imagen sintética de la radiancia \mathcal{L}_{on} correspondiente al modo activo, para las mismas condiciones descritas en la figura 3.6. (Inferior) Se muestran los perfiles de radiancia obtenidos para tres temperaturas de fondo diferentes, donde las líneas continuas representan los valores libres de ruido experimental.	52
3.8.	Montaje experimental basado en tuberías llenas de CO_2 , donde se muestra la detección de dos fugas mediante la configuración de iluminación activa.	54
3.9.	Diferentes vistas del modelo de depósito a escala empleado. En la figura se han señalado dos micro-fugas controladas (#1 y #2), que serán usadas como validación experimental de nuestra metodología.	55
3.10.	Ejemplo de detección de fugas sobre un modelo de depósito a escala, con fugas controladas. Imagen resultado de la fusión entre la imagen original y el procesado espacio-temporal.	56
3.11.	A la izquierda, imagen visible correspondiente a la pieza con presencia de fugas. La imagen de la derecha representa una imagen procesada de la secuencia obtenida, en la que se observa el gas traza emanar de la región.	57
4.1.	Ilustración de un interferómetro de Michelson, componentes principales y esquema de recombinación de los haces.	63

4.2. Ejemplo de interferograma experimental en torno a la posición del máximo, esto es, para pequeñas diferencias de camino óptico. El máximo corresponde al punto en el que la diferencia de camino es nula (<i>Zero Path Difference</i> , ZPD).	67
4.3. Ejemplo de interferograma asimétrico, en la que sólo una de las dos ramas alcanza el número de puntos suficiente para la resolución requerida.	69
4.4. Ejemplo de interferograma simetrizado en el que se observa la deriva sufrida por este en su línea base, lo que provoca el salto brusco en los niveles al concatenar ambas ramas.	70
4.5. Efecto de la apodización en la ILS. Con el enventanado rectangular la ILS es una función <i>sinc</i> , mientras que con el triangular es <i>sinc</i> ² . Se observa una reducción de los lóbulos secundarios a costa de una pérdida de resolución en un factor 1,47 en comparación con la transformada de Fourier de la función rectangular.	71
4.6. Comparativa de espectro experimental apodizado mediante ventana triangular frente a espectro original sin apodizar.	72
4.7. Detalle de la figura 4.6 en la que se muestran las diferencias producidas por el efecto de la apodización triangular de la figura 4.5.	72
4.8. Comparativa de espectros experimentales generados a partir de distintos valores del factor de padding (FP).	73
4.9. Ejemplo de interferograma experimental en el que se indican los puntos de muestreo, responsables de la clara asimetría que presenta.	75
4.10. Ejemplo de interferograma teórico correspondiente a la radiancia que emitiría un cuerpo negro a la temperatura de 350°C.	77
4.11. Representación de las componentes real e imaginaria del espectro correspondiente al interferograma simulado en la figura 4.10.	77
4.12. Comparación entre las fases de alta y baja resolución espectral, donde se aprecia que los efectos simulados pueden aproximarse adecuadamente por términos de baja frecuencia.	78
4.13. Corrección de fase mediante el método de Mertz sobre el interferograma de la figura 4.10. La señal se distribuye únicamente en el dominio real, mientras que la componente imaginaria del ruido es eliminada de ésta, mejorándose la relación señal a ruido.	79
4.14. Función de corrección de fase $PF(x)$ obtenida tras la aplicación del método de Forman.	80
4.15. Ejemplo de imagen hiperespectral en el infrarrojo medio, adquirida con el sistema Telops FIRST-MW, donde se muestra la información espectral contenida en cada píxel de la imagen.	81
4.16. Representación gráfica de un datacubo de imagen hiperespectral, donde se combinan ambas resoluciones espacial (x, y) y espectral (ν)	81
4.17. Equipo de imagen hiperespectral en el infrarrojo medio FIRST-MW de Telops.	82
4.18. Resumen del mecanismo de selección espectral del equipo de imagen hiperespectral FIRST-MW. Figuras adaptadas de la información proporcionada por el fabricante Telops Inc.	83

4.19. Comprobación de distintos desplazamientos en el eje de números de onda, tomando como referencia el modelo Mean Latitude Summer de HITRAN.	85
4.20. Representación de la posición de la línea de absorción seleccionada como referencia (1918 cm^{-1}) en cada píxel del array, previa a la corrección del eje óptico a partir de la ratio entre la posición de la línea de agua y la de referencia.	86
4.21. Diagrama de flujo con las etapas de procesado necesarias para obtener el espectro experimental $S_{Exp}(\nu)$ a partir del interferograma medido igm_{Exp}	87
4.22. Espectro experimental obtenido tras las etapas de procesado propuestas, en comparación con el obtenido tras únicamente aplicar la operación de transformada de Fourier.	88
4.23. Importancia de la selección de un régimen de operación lineal en la medida de la señal interferométrica. Figura adaptada de la representación mostrada en [125].	88
5.1. Diagrama de flujo del algoritmo de ajuste para la concentración y la temperatura, en cada píxel (x, y)	93
5.2. Ejemplo de ajuste de la influencia de la temperatura en la absortividad en el caso de CO_2 y un polinomio de orden 3.	98
5.3. Dependencia de la temperatura del CO_2 a diferentes números de onda. La dependencia con ν es muy acusada de forma que para números de onda muy cercanos los resultados pueden llegar a ser radicalmente diferentes. Las líneas continuas representan los ajustes mediante polinomios de tercer orden.	99
5.4. ILS para el caso de apodización triangular y distintas resoluciones de medida.	100
5.5. Gráfica con las radiancias obtenidas tras la convolución de las funciones de transferencia de la figura 5.4 con un espectro de radiancia de un cuerpo negro a 350°C y un perfil de transmitancia de CO_2	101
5.6. Representación en 3 dimensiones del mapa de errores para el ajuste de temperatura y concentración sobre un espectro típico de transmitancia, correspondiente a 10 cm de camino óptico con un 25 % de concentración de CO_2 , adquirido a una distancia de 2.75 metros.	104
5.7. Configuración experimental empleada en las medidas de validación, desde el punto de vista del sistema de imagen hiperespectral. El CO_2 fluye a lo largo de la tubería de cobre colocada de forma vertical en el centro de la imagen, y es observada frente al cuerpo negro extenso que cumple la función de <i>background</i> de temperatura elevada y controlada.	105
5.8. Espectros experimentales obtenidos tras las etapas de procesado propuestas en el capítulo anterior. Se muestra una comparativa entre un espectro de referencia y un segundo con una cantidad apreciable de CO_2	107

5.9.	Se muestran dos perfiles de densidad de columna recuperados en la salida de la tubería, ambos comparados con el camino óptico estimado para cada píxel. Uno de los perfiles (con marcas en forma de cuadrados) ha sido recuperado mediante el modelo radiométrico completo, que incluye el término de emisión. El segundo de los perfiles (con marcas en forma de círculos) se corresponde con la aproximación de absorción, despreciando los efectos debidos a la propia emisión de la pluma de gases.	108
5.10.	Resultados de la recuperación simultánea de los parámetros densidad de columna y temperatura de CO_2 , para las medidas de validación.	109
5.11.	Ejemplo de ajuste de la transmitancia experimental mediante el método iterativo propuesto.	110
5.12.	Representación del par Q-T correspondiente a los valores simulados junto a los recuperados, para las condiciones de ruido experimental dadas por \mathcal{L}^η	111
5.13.	Representación de la suma del error cuadrático (SSE) entre $\tau_{sim}^{g,compl}$ y τ_{exp}^g como una función de la densidad de columna y la temperatura en torno a una región próxima a los valores de ajuste. La transmitancia experimental se corresponde con un píxel en el centro de la pluma de gases mostrada en la figura 5.10a; el ajuste se realiza en la región espectral delimitada entre 2240 y 2280 cm^{-1}	112
5.14.	Imagen de la densidad de columna de CO_2 recuperada, para las emisiones producidas por un vehículo Diesel.	112
5.15.	Representación del valor de temperatura proporcionado por el ajuste, en las mismas condiciones que la figura anterior.	113
6.1.	Representación de los autovalores correspondientes a los P primeros autovalores, en unidades naturales (a la izquierda) y en unidades logarítmicas (a la derecha).	127
6.2.	A la izquierda, variación de las primeras 5 componentes principales en función de la densidad de columna, para un valor de temperatura constante e igual a 350 K. A la derecha, variación de las primeras 5 componentes principales en función de la temperatura, en este caso para un valor de densidad de columna de 8000 $ppm \cdot m$	127
6.3.	Mapas de temperatura y densidad de columna tras aplicar ambos métodos sobre los datacubos correspondientes a las medidas de validación descritas en el capítulo 5.	128
6.4.	Comparación de perfiles horizontales sobre la boca del tubo (fila 86 en la imagen) tras el proceso de recuperación de datos con ambos métodos. A la izquierda, comparación de los resultados para la densidad de columna, y a la derecha para la temperatura.	128
6.5.	Dispersograma de la densidad de columna (izquierda) y de la temperatura (derecha) estimadas por la metodología basada en componentes principales con respecto a los resultados obtenidos con el método de ajuste iterativo, obteniéndose sendos coeficientes de determinación $R^2 = 0,99985$ y $R^2 = 0,98477$, respectivamente para densidad de columna y temperatura.	129

6.6.	Ejemplo de arquitectura de red basada en un perceptrón multicapa, con un número variable de neuronas en la capa oculta, para la aproximación de T y Q mediante las $P = 5$ primeras componentes principales	131
6.7.	Dispersogramas para la comparación de los resultados proporcionados por la arquitectura de red MLP frente al método de ajuste iterativo. A la izquierda, comparación de la densidad de columna, y a la derecha de la temperatura, obteniéndose los coeficientes de determinación $R^2 = 0,99701$ y $R^2 = 0,94836$, respectivamente.	132
6.8.	Representación de la suma del error cuadrático (SSE) resultado de las pruebas de validación cruzada para la estimación del parámetro σ_{spread}	134
6.9.	Arquitectura para la implementación de la red Generalized Regression Neural Network (GRNN).	135
6.10.	Gráficas comparativas de la estimación de densidad de columna y la temperatura proporcionadas por la red GRNN frente al método iterativo, obteniéndose los respectivos valores del coeficiente de determinación, $R^2 = 0,999845$ y $R^2 = 0,9857$	136
6.11.	Ilustración de ε -insensitive loss function empleada en regresión mediante máquinas de vectores de soporte, adaptada de [116].	136
6.12.	Kernel trick para llevar a cabo la regresión en un espacio de características donde las relaciones sean lineales, aunque de mayor dimensión. Ilustración adaptada de [1].	139
6.13.	Dispersogramas para la comparación de los resultados proporcionados por la arquitectura de red MLP frente al método de ajuste iterativo. A la izquierda, comparación de la densidad de columna, y a la derecha de la temperatura, obteniéndose los coeficientes de determinación $R^2 = 0,9949$ y $R^2 = 0,88313$, respectivamente.	140
7.1.	Ilustración del proceso de reducción de ruido mediante el sobremuestreo, representándose un ejemplo de conversor analógico digital en términos de la densidad espectral de potencia (DEP).	145
7.2.	Diagrama de bloques del proceso de muestreo en un sistema FTIR.	146
7.3.	Figura con distintos valores de offset para factor de diezmado igual a 4.	148
7.4.	Ejemplo de plegado de frecuencias como consecuencia del proceso de diezmado sobre un espectro de cuerpo negro.	153
7.5.	Ejemplo de aplicación del algoritmo de recombinación, donde se muestra el resultado de promediar todas las versiones obtenidas junto a versiones individuales.	154
7.6.	Algoritmo de recombinación de muestras sobre un espectro plano: comparación del promedio frente a espectros individuales.	155
7.7.	Evolución de la varianza de ruido conforme se promedian versiones espectrales generadas con el algoritmo de recombinación de muestras, expresada esta en términos de R_{var}	155
7.8.	Resultado del algoritmo de recombinación para la medida experimental de un quemador de metano estabilizado, representación del espectro obtenido para un píxel de la zona central de la llama para $FD_{max} = 7$	157

7.9. Cálculo de la función R_{var} en el ancho espectral comprendido entre 2450 y 2600 cm^{-1}	158
8.1. Diferentes vistas del quemador tipo Hencken que se empleará en el proyecto EMPRESS, propiedad del National Physics Laboratory. Ilustración adaptada de [90].	162
8.2. Modelo radiométrico de la emisión procedente de una combustión controlada, caracterizada por su temperatura T_g y su transmitancia τ_g	164
8.3. Secuencia de procesamiento para la obtención de espectros experimentales y sintéticos, en los que se basa la metodología de obtención de la temperatura de llamas propuesta.	166
8.4. Comparación del coeficiente de absorción del CO_2 obtenido con HITEMP frente al resultante de modelar su dependencia con la temperatura a partir de funciones polinómicas para cada línea espectral, para el caso de $T = 2350\text{ K}$	167
8.5. Comparación de la radiancia espectral estimada para la llama estándar y las temperaturas de calibración seleccionadas (200 y 580°C).	170
8.6. Ejemplo de interferograma adquirido en un quemador de tipo Bunsen, al que se le ha sustraído la componente asociada al offset instrumental.	171
8.7. Análisis espectral del interferograma mostrado en la figura 8.6, en el que se muestran ampliadas las porciones correspondientes a las fluctuaciones temporales y a las señales ópticas.	172
8.8. Distribución espacial de las fluctuaciones temporales en un quemador de tipo Bunsen. A la izquierda, imagen de la desviación estándar de las componentes del interferograma de baja frecuencia, esto es, por debajo de la frecuencia de corte del detector, $\nu_{cut} = 1800\text{ cm}^{-1}$. A la derecha, imagen de la desviación estándar de las componentes del interferograma de alta frecuencia, por encima de ν_{cut}	173
8.9. Resultado de aplicar el algoritmo de recombinación sobre un interferograma procedente de la región de altas fluctuaciones en un quemador de tipo Bunsen. se compara el espectro original con el obtenido para un factor de diezmado $DF_{max} = 15$	174
9.1. Simulación de interferograma completo resultado de introducir una fluctuación temporal sobre la intensidad entrante en el sistema interferométrico.	180
9.2. Zoom en un entorno próximo a la posición de ZPD sobre las componentes del interferograma denotadas como I_{sp} , I_{fl} y I_{ct}	180
9.3. Figura correspondiente al espectro modulado por una señal cosenoidal.	181
9.4. Imágenes del interferograma resultante en diferentes posiciones del barrido del espejo móvil para una llama de alcohol, donde se comprueba el efecto denominado como flickering.	183
9.5. Comparación de los interferogramas obtenidos antes (en azul) y después (en naranja) de la aplicación del método de corrección de fluctuaciones propuesto, calculados sobre el píxel (80, 34).	184

9.6.	Comparación entre los espectros obtenidos previa corrección de fluctuaciones, y tras su aplicación, calculados sobre el píxel (80, 34).	184
9.7.	Ilustración del esquema de medida en la medida de la radiación emitida por un quemador Bunsen mediante un espectrómetro de imagen.	185
9.8.	Imagen de radiancia espectral en $\nu = 2175 \text{ cm}^{-1}$ para la medida experimental sobre una llama proveniente de un quemador tipo Bunsen.	186
9.9.	Ejemplo de interferograma experimental correspondiente al píxel (80, 34) de la imagen de radiancia espectral, antes y después de llevar a cabo la corrección de fluctuaciones.	187
9.10.	Comparación entre los espectros obtenidos previa corrección de fluctuaciones, y tras su aplicación, calculados sobre el píxel (80, 34).	188
10.1.	Ilustración de la propagación de los rayos en el interior del interferómetro tras introducir una lente correctora. Diagrama facilitado por el fabricante del sistema, Telops Inc.	192
10.2.	Proceso de calibración del sistema de imagen hiperespectral FIRST-MW, en las instalaciones del Centro Español de Metrología (CEM), dentro del Laboratorio de Termometría de Radiación.	193
10.3.	Medida realizada en CEM sobre un quemador de tipo Bunsen, en este caso, utilizando un cuerpo negro estabilizado como fondo.	194
10.4.	Imágenes con los valores recuperados de temperatura y densidad de columna para dióxido y monóxido de carbono, así como una estimación del CO_2 ambiente.	195
10.5.	Ejemplo de ajuste para un píxel representativo del interior de la zona de combustión.	197
10.6.	Distribución espectral de la desviación estándar correspondiente a las incertidumbres asociadas con la emisividad y temperatura de los cuerpos negros empleados en la calibración, esto es, σ_c , para un píxel representativo y para el ancho de banda empleado en el ajuste iterativo.	200
10.7.	Resultado del método de Monte Carlo para la propagación de incertidumbres a las variables recuperadas en el proceso de ajuste iterativo. La estimación de la función de densidad de probabilidad basado en el kernel de Epanechnikov. En gris se muestra el intervalo de confianza del 95 %.	201

Índice de tablas

3.1. Concentración mínima detectable para los métodos activo y pasivo, en el caso de detección de CH_4 con $T_g = 280K$ para diferentes temperaturas de radiación de fondo. En todos los casos se asume que el camino óptico recorrido es 10 cm y que se emplea un sistema de imagen IR operando en el infrarrojo medio con una NETD de 50 mK @300K, y un filtro interferencial de 375 nm de ancho de banda centrado en la banda de absorción de los hidrocarburos, en $\lambda_0=3,3 \mu m$	49
3.2. Comparación de la relación señal a ruido para la detección de metano al emplear los métodos activo y pasivo, como se describe en el texto. Los valores mostrados son calculados en el punto de máxima concentración, mínima transmitancia en las figuras 3.6 y 3.6, para un valor constante de $T_g = 280 K$	50
4.1. Tabla resumen de las especificaciones técnicas del FIRST-MW.	84
6.1. Cuadro resumen del error promedio por cada una de las aproximaciones implementadas en el capítulo tomando como referencia el método de ajuste iterativo y las medidas experimentales de validación del capítulo 5.	141
6.2. Tabla resumen de los coeficientes de determinación obtenidos tras la comparación entre las diferentes entre las diferentes alternativas frente al método de ajuste iterativo.	141
10.1. Parámetros de calibración correspondientes a las medidas realizadas en las instalaciones del Centro Español de Metrología.	199

"The scientific man does not aim at an immediate result. He does not expect that his advanced ideas will be readily taken up. His work is like that of the planter - for the future. His duty is to lay the foundation for those who are to come, and point the way."

Nikola Tesla

"Hyperspectral imagery is big. You might think space is big, but space is only three dimensional."

James Theiler, Bernard Foy

"...Je n'ai fait cette lettre-ci plus longue que parce que je n'ai pas eu le loisir de la faire plus courte..."

Blaise Pascal

Motivación e hipótesis de trabajo

En su sentido más amplio, el término **teledetección** (en inglés, *remote sensing*) [112, 18] hace referencia a aquellas técnicas que permiten extraer información relativa a un objeto sin que medie contacto directo entre el sensor empleado y dicho objeto. Fruto de este planteamiento convergen diferentes ámbitos de conocimiento, desde el análisis de datos al modelado físico de los fenómenos bajo estudio, así como el uso de distintas tecnologías y principios de medida, dando lugar al surgimiento frecuente de relaciones interdisciplinares. Todos estos elementos son combinados para lo que generalmente se denomina como resolución del **problema inverso** [123], donde se trata de estimar algunos parámetros del modelo a partir de los datos observados.

Históricamente, el surgimiento de nuevas técnicas de teledetección ha estado íntimamente ligado a la observación sistemática de la Tierra, y, en concreto, al lanzamiento de los primeros satélites provistos de sensores de imagen, como la serie TIROS (*Television Infrared Observation Satellite*) [110] en la década de los 60. A estos sobrevinieron nuevas misiones portadoras de instrumentación más compleja; es el caso de la serie LANDSAT [71] y otras similares, capaces de aunar dispositivos de imagen multiespectral con una resolución espacial cada vez más asombrosa.

Sin embargo, esto último no implica que el ámbito de aplicación de la detección remota se haya restringido al procesamiento de imágenes satélite, sino que esquemas de detección con planteamientos similares se aplican a sensores de distinta índole, como es el caso de sondas espaciales, radiómetros y fotómetros, la tecnología LIDAR (*Light Detection and Ranging*) [134], y el radar convencional, o los más recientes radares interferométricos de apertura sintética [136], por citar sólo algunos ejemplos.

En este contexto, la presente tesis doctoral se centra en el estudio de la **teledetección de gases** mediante sistemas de **imagen infrarroja** (IR). Son muchas las aplicaciones que precisan de la detección y caracterización de nubes de compuestos gaseosos. Algunas abarcan desde el ámbito militar, como la detección e identificación de agentes químicos; el medioambiental, donde destaca la monitorización de fuentes de emisión de gases contaminantes; el estudio de la física atmosférica y la observación astronómica; o de carácter industrial, como la caracterización de procesos de combustión o de la detonación de explosivos.

Dentro de la diversidad de tareas que podríamos afrontar tras las etapas características de detección e identificación, el objetivo principal de este trabajo es realizar una contribución al **problema de la cuantificación** de magnitudes físicas como son la densidad de columna (producto de la concentración por el camino óptico) o la temperatura. Estas va-

riables, en conjunto con la información relativa al sensor y a la configuración del escenario de medida, permiten la estimación de parámetros tan importantes como la concentración o la cantidad emitida de un compuesto en términos absolutos.

En ocasiones, cuantificar la cantidad de gas a través de la radiación detectada puede resultar, sin embargo, un problema pobremente condicionado [73] y, por tanto, sujeto a la aparición de relaciones de indeterminación fruto del acoplamiento entre variables, donde los algoritmos de cuantificación deben completarse con la información relativa al proceso físico que interviene en cada aplicación. Algunos algoritmos recurren al uso de propiedades como la linealidad [41] (o, en contrapartida, la falta de ésta [127]) inherente a ciertas magnitudes radiativas, el uso de información espacial, u otras asunciones aún más específicas [73]. En particular, muchos autores [130, 73] señalan la necesidad del desarrollo de nuevas estrategias que permitan la cuantificación de la cantidad de gas en casos relevantes, como al considerar ausencia de equilibrio térmico, donde la temperatura ahora resulta un parámetro difícil de estimar.

Nuestra aproximación hace uso de un sistema de **imagen hiperespectral**, que mediante el uso de un interferómetro de Michelson es capaz de proporcionar resoluciones espectrales de $0,25\text{ cm}^{-1}$, y que opera en la región del infrarrojo medio, que es donde se encuentra la firma espectral de la mayor parte de especies de interés. Esto permite la aplicación tanto de técnicas propias del ámbito de la espectroscopia, como de nuevas estrategias. Algunas de ellas se basan en la modelización de los datos observados y el desarrollo de entornos de simulación, lo que da lugar a nuevas formulaciones del problema de la cuantificación.

Sin embargo, el uso de este tipo de instrumentación tiene como contrapartida un incremento notable de la complejidad, asociada a la gran cantidad de información que proporciona, lo que se traduce en un elevado uso de recursos y tiempos de computación. Esta situación sugiere la búsqueda de nuevas alternativas que hagan un uso eficiente de la **alta dimensionalidad** presente en los datos experimentales; es el caso de técnicas estadísticas como el *análisis por componentes principales*, empleadas en la reducción de la dimensionalidad y la multicolinealidad [133]. La aplicación de estas técnicas facilita el uso de nuevos planteamientos para la estimación de parámetros de una forma más efectiva y generalizable, como es el uso de métodos de regresión de carácter multivariante.

Las técnicas de medida basadas en la espectrorradiometría de imagen suponen una nueva forma de afrontar problemas metrológicos de actualidad. Un ejemplo es la medida de la temperatura en procesos de combustión, especialmente en aquellos donde los gases calientes llegan a alcanzar temperaturas del orden de 2400 K. Bajo estas circunstancias, algunas de las técnicas empleadas, como el uso de termopares, pueden llegar a introducir errores de cientos de grados [76], debido fundamentalmente al enfriamiento local que inducen ocasionado por la baja capacidad calorífica de los gases. Dado el gran número de aplicaciones industriales, como la realización de ensayos a fuego o la caracterización de motores y turbinas, este problema es tratado en el marco del proyecto europeo 14IND04 EMPRESS (*enhanced process control through improved temperature measurement*) [90] perteneciente al programa EMRP (*European Metrology Research Programme*).

Uno de los objetivos perseguidos en este proyecto es la reducción de la incertidumbre en la medida de la temperatura en al menos un orden de magnitud, lo que supone alcanzar estimaciones con errores próximos al 1 %. La metodología de trabajo compren-

de la intercomparación de diferentes técnicas de medida, como las basadas en *scattering Rayleigh* [122] o las denominadas *degenerate four-wave mixing* [68], y, entre otras, la espectroscopia de emisión en el infrarrojo medio [98].

1.1. Objetivos e hipótesis de trabajo

Esta tesis doctoral puede entenderse como la persecución de tres objetivos principales, que harán las veces de hilos conductores en torno a los cuales se articula el trabajo desarrollado. Dichos objetivos se describen como sigue a continuación:

- **Objetivo 1.** El primer objetivo de esta tesis se centra en abordar el problema de la **cuantificación de gases mediante un sistema de imagen hiperespectral** en la región infrarroja del espectro. De forma implícita, esto conlleva la estimación unívoca de magnitudes físicas como la densidad de columna o la temperatura de los compuestos bajo análisis.
- **Objetivo 2.** El siguiente propósito consiste en **reducir la alta dimensionalidad y el elevado volumen de los datos** que proporciona el sistema espectrorradiómetro de imagen empleado. En general, se motiva la búsqueda de alternativas más eficientes, que extraigan la información contenida en los cubos de datos y permitan la formulación de nuevas estrategias de recuperación.
- **Objetivo 3.** El último objetivo plantea la aplicación de tanto la instrumentación como las metodologías desarrolladas en los objetivos anteriores, a la resolución de un problema metrológico actual: **la medida precisa de la temperatura en procesos de combustión**.

Para alcanzar los propósitos principales de esta tesis se requiere la consecución de los siguientes **objetivos específicos**:

- *Implementación de la teledetección de gases mediante sensores de imagen infrarroja en banda integrada.* Para ello será necesario introducirnos en la radiometría del problema, así como en todo lo referente a las cuestiones clásicas de instrumentación IR y técnicas de procesado de imagen.
- *Puesta a punto y caracterización de un sistema de imagen hiperespectral basado en un interferómetro de Michelson.* Esto incluye el desarrollo tanto de técnicas de procesado bien conocidas como de otras específicas, resultantes de integrar ambos dominios espectral y espacial en un único dispositivo.
- *Desarrollo de un entorno completo de simulación de modelos de transferencia radiativa.* Esto es, que sea capaz de reproducir de forma precisa la radiometría del problema, fuentes de excitación, medio y efectos propios del equipo de medida.
- *Desarrollo de algoritmos de recuperación de datos.* El resultado clave es la obtención de información física cuantitativa sobre el gas estudiado. La exactitud de esta información deberá ser evaluada mediante experimentos de validación.

- *Reducción de la complejidad y extracción eficiente de la información.* Dada la extraordinaria cantidad de datos provista por los sistemas de imagen hiperespectral, el uso de técnicas de reducción de la dimensionalidad se prevé sea un elemento clave en la implementación práctica de la recuperación de datos.
- *Generalización de los métodos de recuperación de datos.* Uno de los objetivos es explorar el empleo de técnicas de regresión multivariante (redes neuronales, máquinas de vectores de soporte, etc.) una vez concluida la etapa de reducción de la dimensionalidad.
- *Caracterización de combustiones de alta temperatura.* Se prevé la medida de fenómenos altamente energéticos (> 2400 K), lo que implica la adaptación de la instrumentación necesaria así como la propuesta de una nueva metodología.
- *Mitigar el efecto producido por las fluctuaciones temporales en la señal interferométrica.* Es un fenómeno bien conocido el hecho de que en multitud de combustiones se observen modulaciones temporales, y puesto que éstas pueden ser del orden de los tiempos de barrido de nuestro sistema de medida, será conveniente analizar su impacto.

Los objetivos enunciados serán afrontados bajo la consideración de las siguientes **hipótesis de trabajo**:

1. Se dispone de elementos detectores de alta sensibilidad e instrumentación óptica que tienen como principal característica la operación en la región correspondiente al espectro infrarrojo. En ella poseen *firma espectral* un gran número de compuestos gaseosos de interés industrial y medioambiental, como se explicará posteriormente, por lo que se estima que estos puedan ser convenientemente detectados.
2. La instrumentación disponible y, en concreto, el uso de un espectrorradiómetro de imagen, nos proporciona una resolución espectral capaz de resolver la estructura fina de una gran cantidad de compuestos. Nuestra hipótesis se basa en considerar que esta información es suficiente como para abordar con éxito el problema de la cuantificación de gases, resolviendo la relación de acoplamiento entre la densidad de columna y la temperatura.
3. Si reparamos en que es posible predecir el comportamiento radiométrico de un compuesto (su *firma espectral*) únicamente a partir de un número reducido de parámetros, como su concentración o temperatura, es posible considerar que la información proporcionada por el sistema de imagen hiperespectral pueda llegar a ser, en cierta forma, redundante, por lo que se prevé que métodos de tipo estadístico logren reducir la alta dimensionalidad presente.
4. La energía radiada por un cuerpo depende en gran medida de la temperatura a la que éste se encuentre. Este proceso es gobernado por la emisividad, como se explicará más adelante, y en el caso de los gases asumiremos que una resolución espectral suficiente permite el desacoplamiento entre los efectos de la emisividad y la temperatura, pudiéndose determinar esta última unívocamente a partir del estudio de la radiación emitida.

Principales áreas de conocimiento

Debido a la diversidad de las temáticas que han sido tratadas y a la naturaleza de las mismas, la presente tesis doctoral tiene un marcado carácter interdisciplinar. El campo de la teledetección agrupa por sí mismo a una gran variedad de principios de medida y tecnologías que permiten la obtención de información sensorial de muy diversa índole. Por su parte, el análisis de esta información requiere de una adecuada fundamentación de los procesos físicos intervinientes, que permita la construcción de modelos, y donde cada día cobran más importancia áreas como la simulación por computador.

En nuestro caso, la espectrorradiometría de imagen, o imagen hiperespectral, surge precisamente de la unión de dos campos de aplicación, la imagen infrarroja y la espectroscopia FTIR, donde prevalecen disciplinas como el tratamiento digital de señales, la instrumentación electrónica o el procesamiento de imagen. Los principios de operación empleados presentan cada vez más complejidad, debido, en gran parte, al desarrollo de nuevas técnicas, estrategias y algoritmos de recuperación de parámetros. Esto ha generalizado el uso de una gran variedad de herramientas provenientes de campos como el aprendizaje máquina, la estimación probabilística, el análisis multivariante o la optimización matemática, por citar sólo algunos ejemplos.

De forma gráfica, la figura 1.1 ilustra esta heterogeneidad de disciplinas a la que aludimos, encuadrando esta tesis como la intersección de, fundamentalmente, tres áreas de conocimiento: la teledetección, la imagen hiperespectral y la recuperación de datos.

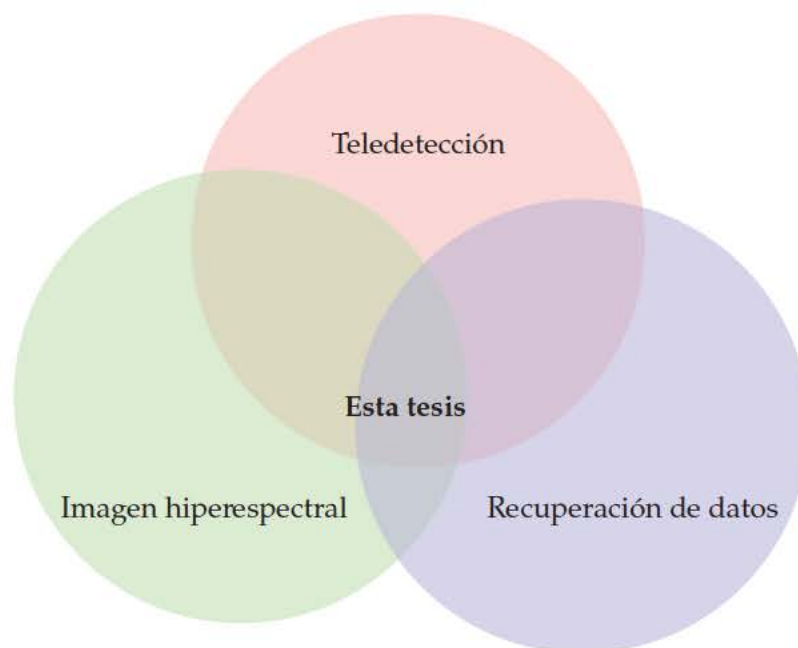


Figura 1.1: Diagrama de Venn en el que se introduce esta tesis doctoral como la intersección de diferentes disciplinas.

Relación con las líneas de trabajo del grupo de investigación LIR-UC3M

La totalidad de los trabajos que conforman esta tesis doctoral han sido desarrollados en forma de contribución a las líneas de investigación propias del Laboratorio de Sensores, Teledetección e Imagen Infrarroja de la Universidad Carlos III de Madrid (LIR-UC3M). Históricamente, dentro del grupo LIR-UC3M se han venido gestando de forma paralela dos áreas diferenciadas: la **termografía infrarroja** (IR) y la **espectroscopia FTIR** (*Fourier Transform InfraRed*), especialmente mediante técnicas *Open-Path*. Ambos dominios evolucionaron, de forma que la termografía IR dispuso de cada vez más información espectral (sistemas multiespectrales) y los problemas abordados también eran más complejos (ensayos no destructivos, caracterización térmica de materiales, o análisis de defectos mediante transformada de Fourier). En la unión de ambas líneas principales surgen los dispositivos de *imagen hiperespectral* o *espectrorradiómetros de imagen*, que aúnan la información contenida en ambos dominios, espacial y espectral, y donde se enmarca el trabajo presentado en esta memoria. Otras áreas de interés del grupo LIR-UC3M se corresponden con el diseño y fabricación de sensores electroópticos en aplicaciones de tipo aeroespacial, el diseño de algoritmos para la recuperación (del término anglosajón, *retrieval*) de parámetros atmosféricos, la termografía activa, la calibración radiométrica, o la imagen biomédica.

En este marco, el Ministerio de Economía y Competitividad ha contribuido en la financiación del presente trabajo mediante la dotación asignada a través del programa de ayudas para la Formación de Personal Investigador (FPI), asociada al proyecto de investigación "Sensor de polvo marciano MEIGA-METNET. Basado en un microsensor espectral infrarrojo y barredor de polvo", con referencia AYA2011-29967-C05-03.

Como consecuencia de los trabajos y contribuciones previamente realizados por el grupo LIR-UC3M, éste cuenta con una amplia infraestructura tecnológica, sólo equiparable a otros centros de investigación de gran prestigio internacional, que permiten cubrir la totalidad de la banda EO/IR (electroóptica e infrarroja) con sistemas de altas prestaciones tanto radiométricas como en lo que a resolución espacial y espectral se refiere. Entre la instrumentación más destacada mencionaremos la adquisición del sistema de imagen hiperespectral del que haremos uso a lo largo de este trabajo, basado en tecnología FTIR y cuyas particularidades le convierten en un equipo exclusivo, del que apenas hay una decena de unidades fabricadas.

1.2. Metodología y estructura de la tesis doctoral

El trabajo desarrollado se expone en la presente memoria a partir de una estructura delimitada en cinco partes, tomando como base la siguiente metodología:

- (I) En la **parte I** de esta memoria comenzaremos estudiando un problema característico de la detección de gases mediante un sistema de imagen infrarroja de banda integrada, y que no requiere, al menos *a priori*, de sistemas con un mayor grado de sofisticación en términos de resolución espectral. En concreto, se aborda el problema de la detección de fugas de gases mediante técnicas de iluminación activa, llegándose a proponer un dispositivo que resuelve aplicaciones de interés industrial. Esto se aborda en el **capítulo 3**, pero previamente será necesario introducir los conceptos

fundamentales de la tecnología infrarroja y su aplicación a las tareas de teledetección, desarrollados en el **capítulo 2**.

- (II) Una vez ya nos hemos enfrentado al problema de la teledetección de gases, el siguiente paso es ahondar en este proceso tratando de inferir una mayor cantidad de información, y extender así nuestro trabajo hasta abarcar la cuantificación, que sería de gran interés para un gran número de aplicaciones. Esto nos lleva a la **parte II** de este trabajo, en la que es necesario recurrir al empleo de instrumentación hiperespectral, que sea capaz de dotarnos de información suficiente como para recuperar magnitudes difícilmente resolubles de otra forma, como es el caso de la concentración y la temperatura. Para ello, el **capítulo 4** tiene por objeto proporcionar una adecuada comprensión del principio de funcionamiento del equipo de medida, describiendo las magnitudes de operación fundamentales así como las técnicas de procesado espectral implementadas, de las que se hará uso reiteradamente en este trabajo. El **capítulo 5** aborda los elementos esenciales de la cuantificación de gases mediante imagen hiperespectral, presentando la algorítmica y metodología desarrolladas así como los resultados experimentales referidos a su validación.
- (III) Ya resuelto uno de los objetivos principales enunciados en esta tesis, la **parte III** tiene por objeto reducir la elevada complejidad de los algoritmos desarrollados. El **capítulo 6** se centra en lograr una adecuada reducción de la dimensionalidad que permita un menor tiempo de cómputo y uso de recursos, a la vez que preserve las prestaciones obtenidas. El **capítulo 7** profundiza en este aspecto proponiendo una metodología que permite reducir los datos adquiridos de partida tomando ventaja del elevado grado de sobremuestreo con el que se desarrollan estos sistemas, esto es, orientando la adquisición de datos interferométricos a un uso más eficiente en términos de relación señal a ruido.
- (IV) La **parte IV** de este trabajo tiene por objeto aplicar un buen número de los resultados obtenidos a un problema metrológico real, la medida precisa de la temperatura en procesos de combustión, lo que nos servirá para poner a prueba parte del trabajo desarrollado. En el **capítulo 8** se describe el planteamiento propuesto, presentándose el principio de medida seleccionado, la espectroscopia de emisión, y la metodología aplicada. Sin embargo, el análisis de este tipo de fenómenos, de naturaleza dinámica, da lugar a la aparición de artefactos y distorsiones en los espectros medidos. Por ello, el **capítulo 9** puede entenderse como un paréntesis, que emplearemos para comprender mejor las implicaciones de este problema y proponer un algoritmo de corrección. Tras esto, el **capítulo 10** retoma la metodología descrita en el **capítulo 8** aplicándola sobre casos experimentales, mostrándose los resultados obtenidos y analizándose las prestaciones del método propuesto.
- (V) Finalmente, la **parte V** consta del **capítulo 11**, en el que se describen las conclusiones y resultados extraídos de las investigaciones realizadas, exponiéndose las principales contribuciones llevadas a cabo en el campo de la aplicación de la espectrorradiometría de imagen a problemas de teledetección de gases.

PARTE I:

TELEDETECCIÓN DE GASES MEDIANTE
IMAGEN INFRARROJA

Fundamentos físicos e introducción a la tecnología infrarroja

El presente capítulo tiene como propósito servir de introducción a los sistemas electro-ópticos de imagen que operan en la banda infrarroja del espectro. Para ello, comenzaremos presentando los principios teóricos que servirán para fijar los conceptos más relevantes, desde el punto de vista de este trabajo, para los planteamientos que se desarrollarán en las siguientes secciones y capítulos. Tras esto, se desglosarán los principales elementos que conforman un sistema de imagen en el infrarrojo, junto a las figuras de mérito que mejor nos ayudarán en su caracterización. Y por último, se finaliza describiendo los principios básicos de teledetección de gases, aunque este último punto será conveniente y reiteradamente revisado conforme se aborde en capítulos más avanzados.

A modo de breve introducción histórica es habitual referirse al astrónomo anglo-alemán William Herschel, quien allá por el año 1800 [53] fue el primero en lograr demostrar la existencia de la radiación infrarroja mediante un prisma para dispersar la luz del sol y un termómetro con el que registrar la temperatura para cada zona del espectro. El mismo descubridor llegó a expresar la aparente *invisibilidad* con una cita ya célebre [53]:

“...There are rays coming from the sun... invested with a high power of heating bodies but with none of illuminating objects... The maximum of the heating power is vested among the invisible rays... It may be pardonable if I digress for a moment and remark that the foregoing researches ought to lead us on to others...”

A lo largo del siglo XIX se desarrollaron detectores cada vez más sensibles como los termopares, las termopilas y los bolómetros [106]. Mientras, en paralelo, los espectrómetros por difracción dieron pie al nacimiento de la espectroscopia infrarroja. Esta rápida evolución propició un enorme progreso tanto a nivel teórico como práctico en este tipo de tecnología emergente en aquel entonces. En las décadas posteriores, tuvo un papel relevante en su desarrollo el establecimiento de los fundamentos de la radiación térmica [53], con el descubrimiento de la ley de Stefan-Boltzmann, la ley de desplazamiento de Wien y finalmente la ley de Planck, en las que profundizaremos más adelante.

Tras el desarrollo de las Guerras Mundiales, los sensores infrarrojos fueron mejorados de forma notable y su uso se vio en gran medida ampliado en el ámbito militar, aunque, los avances llevados a cabo pronto se extendieron hacia nuevas aplicaciones en la industria, la ciencia o la medicina. Desde entonces, la tecnología infrarroja ha jugado un importante papel en el desarrollo de numerosos campos (telecomunicaciones, industria armamentística, medicina, medio ambiente, sensores de propósito general,...) hasta lle-

gar a las últimas décadas, de forma que actualmente se encuentra presente en una gran variedad de áreas, consolidándose como un ejemplo de transversalidad.

2.1. La región infrarroja del espectro EM

Dentro del espectro electromagnético (EM), la región correspondiente a la radiación infrarroja (IR) abarca aproximadamente desde las $0,78 \mu m$ hasta las $300 \mu m$, esto es, entre la zona visible del espectro ($0,4 \mu m - 0,78 \mu m$) y la asociada a las microondas o, de forma más estricta, a la banda correspondiente a los Terahertzios, de explotación mucho más reciente. En la figura 2.1 se muestra una de las múltiples clasificaciones del espectro electromagnético [27] que podemos encontrar. Se han señalado dos bandas, MIR y TIR, dentro de la región IR, cuyo significado se puede apreciar atendiendo a la siguiente figura 2.2.

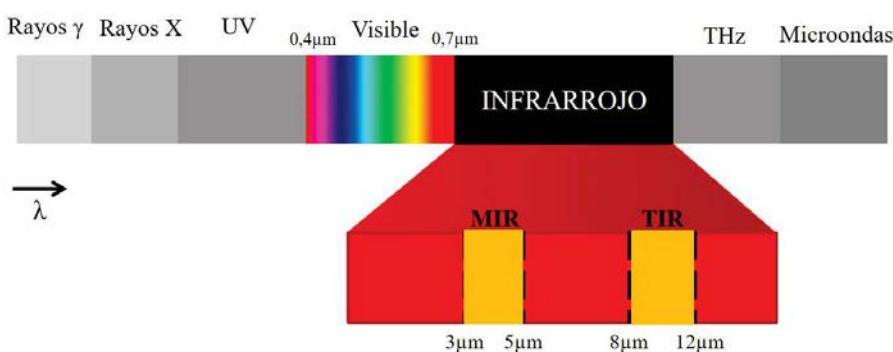


Figura 2.1: Clasificación de las principales regiones de espectro electromagnético, atendiendo a su longitud de onda, y ubicación de la región infrarroja.

En ella se muestra un ejemplo de transmitancia atmosférica en el infrarrojo, donde podemos encontrar las *ventanas de transmisión* que resultan de la atenuación producida por compuestos como el CO_2 o el vapor de agua. Atendiendo exclusivamente a dichas ventanas, es habitual diferenciar tres regiones dentro del espectro infrarrojo. Aunque dicha clasificación puede variar en función del ámbito en el que trabajemos, en general es posible distinguir [50]:

- *Infrarrojo cercano* o NIR (*Near InfraRed*), desde las $0,7 \mu m$ hasta las $1,1 \mu m$. Es una de las regiones más explotadas y con una gran diversidad de usos: comunicaciones, instrumentación, imagen médica y satélite o seguridad entre muchas otras. Uno de sus mayores atractivos es la relativa simplicidad, y bajo coste de los dispositivos que operan en dicha banda. Fuentes de tipo láser o LED se presentan como tecnologías ya asentadas, mientras que elementos detectores como fotodiodos o fototransistores son igualmente sencillos de encontrar y manejar. Los sistemas de imagen NIR pueden incluso llegar a emplear los mismos detectores de silicio que habitualmente se emplean en cámaras visibles convencionales.
- *Infrarrojo medio* o MIR (*Mid InfraRed*), desde las $3 \mu m$ hasta las $5 \mu m$. Esta será la banda de mayor interés para esta tesis, y donde se concentrará prácticamente la

totalidad del trabajo llevado a cabo. Dentro de esta ventana de transmisión se encuentran las firmas espectrales de una gran cantidad de gases, lo que permite su detección e identificación. Además, en esta región hay una contribución importante de la radiación térmica emitida por cuerpos a temperaturas cercanas al ambiente o ligeramente superiores. Precisamente en $\lambda = 4 \mu\text{m}$ presenta su máximo de emisión la radiación producida por un cuerpo a 475°C .

- **Infrarrojo térmico o TIR (Thermal InfraRed)**, desde las $8 \mu\text{m}$ hasta las $12 \mu\text{m}$. Es, junto con la banda NIR, una de las regiones más empleadas y en las que la atmósfera tiene una elevada transmitancia. Recibe la denominación de *térmica* dado que es aquí donde se concentra la distribución de energía radiada por cuerpos a temperaturas cercanas al ambiente, puesto que el máximo de emisión de un cuerpo a 25°C se encuentra en torno a $10 \mu\text{m}$. Ello, junto al surgimiento de tecnologías de detección relativamente baratas, ha popularizado su uso en aplicaciones termográficas de uso generalizado.

De forma adicional, se suele distinguir una cuarta región, denominada como *infrarrojo de onda corta* o SWIR (*Short Wavelength InfraRed*), desde las $1,1 \mu\text{m}$ hasta las $2,5 \mu\text{m}$. En contraposición a la banda NIR, la región SWIR es una de las menos exploradas, debido fundamentalmente a la mayor atenuación atmosférica, que limita en gran medida su rango de aplicabilidad. Además, las tecnologías de detección e iluminación presentan mayores costes y dificultades de implementación, lo que ha encarecido este tipo de sistemas.

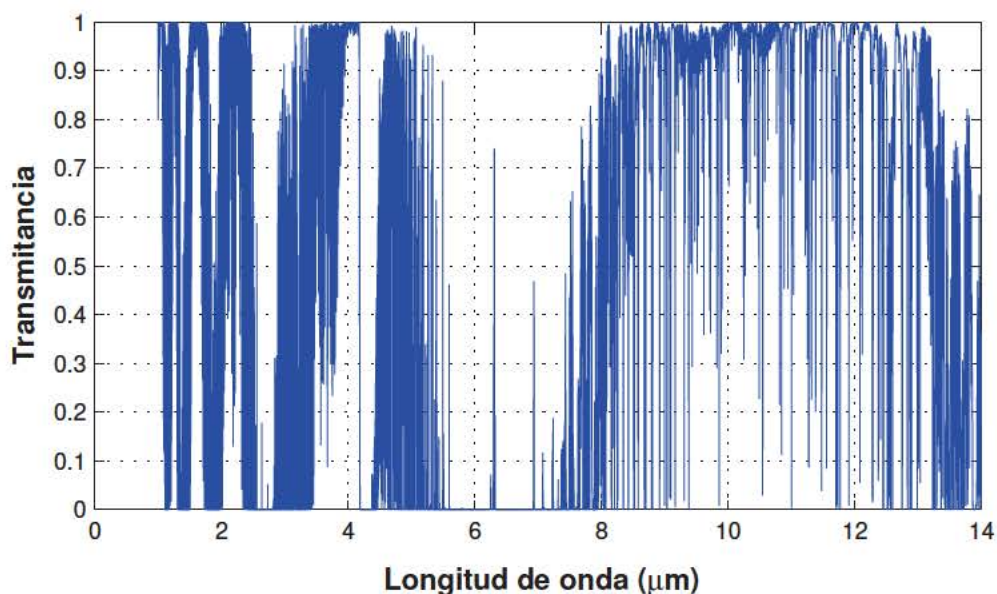


Figura 2.2: Transmitancia atmosférica en función de la longitud de onda, de 1 a $14 \mu\text{m}$, donde pueden distinguirse las regiones NIR, SWIR, MIR y TIR. Se ha empleado el modelo atmosférico denominado Mean Latitude Summer (MLS), correspondiente a una distancia de 1 kilómetro y temperatura ambiente de 296K .

2.2. Introducción a la radiometría

En todo nuestro trabajo va a ser esencial cuantificar la radiación infrarroja y conocer las leyes básicas que gobiernan su emisión, transmisión y absorción. De ello se ocupa la parte de la óptica conocida como radiometría.

2.2.1. Magnitudes radiométricas: la radiancia

Los detectores IR usualmente nos proporcionan una medida de la radiación incidente a lo largo de un cierto periodo de tiempo, denominado *tiempo de integración*, durante el cual los circuitos de lectura *integran* la radiación captada en el material detector, en un proceso análogo al *tiempo de obturación* empleado por las cámaras visibles convencionales, dando una señal proporcional a la energía. Es conveniente por eso caracterizar la radiación en unidades de *potencia radiante* o *flujo radiante*, esto es, energía por unidad de tiempo, $\Phi[W]$. No obstante, tiene mayor utilidad práctica introducir las unidades de *irradiancia*, $E [W/m^2]$, potencia por unidad de área, o *intensidad*, $I [W/sr]$, potencia por unidad de ángulo sólido. Esta última magnitud es ampliamente utilizada en el ámbito de los radiómetros, mientras que la irradiancia es de uso común en campos como la fotónica, la optoelectrónica y las comunicaciones ópticas. El nombre de irradiancia suele reservarse para la potencia incidente por unidad de área, mientras que la potencia emitida por unidad de área recibe el nombre de *exitancia*, $M [W/m^2]$.

Sin embargo, al tratar con sistemas de cierta complejidad, y que además formen imagen, se hace necesario definir una nueva magnitud que caracterice completamente la distribución espacial y angular de la radiación. Esta magnitud es la *radiancia* [84], y se define como *el flujo radiante o potencia por unidad de ángulo sólido en la dirección del rayo y por unidad de área proyectada perpendicular al rayo*, lo que se traduce en la expresión 2.1, donde θ es el ángulo formado por el rayo y la normal a la superficie considerada.

$$\mathcal{L} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \Omega \partial A \cos \theta} \quad [W/m^2 \cdot sr] \quad (2.1)$$

Análogamente puede definirse la radiancia como potencia por unidad de área y de ángulo sólido proyectado perpendicular al área. El principal atractivo de esta magnitud es su propiedad de *invarianza*, demostrada por Nicodemus en su ya célebre artículo de 1962 titulado, como no podía ser de otra forma, *Radiance* [84]. Dicha propiedad implica que siempre y cuando nos encontremos en el interior de un medio con ausencia de pérdidas por absorción, *scattering* o reflexión, y no cambie el índice de refracción, el valor de la radiancia se mantendrá constante a lo largo del recorrido de cualquier rayo que estemos considerando. Esta propiedad permite simplificar enormemente los cálculos radiométricos, y en la sección 2.4.3 mostraremos un caso relevante de su aplicación.

2.2.2. Absortancia, reflectancia y transmitancia

Como regla general, si durante la propagación de una onda electromagnética las propiedades del medio cambian de forma brusca, como al encontrarse con la superficie de un objeto, la energía incidente será bien absorbida por el nuevo medio, transmitida a

través de éste o, por último, reflejada en mayor o menor medida. Denominándose respectivamente α , τ y ρ a las fracciones absorbida, transmitida y reflejada, el principio de conservación de la energía impone el cumplimiento de la siguiente relación:

$$\alpha + \tau + \rho = 1 \quad (2.2)$$

donde α , τ y ρ reciben los nombres, respectivamente, de absorptancia, transmitancia y reflectancia.

Sin embargo, estos tres fenómenos no siempre se presentan de forma apreciable en todos los casos, dando pie a simplificaciones fruto de asumir la ausencia de alguno de los términos comentados. Más en concreto, la mayor parte de los sólidos y líquidos se comportan como opacos ($\tau = 0$) en el infrarrojo más lejano (bandas MIR y TIR) donde, pese a que pueda existir cierta capacidad de penetración, es habitual no considerarla en la mayor parte de aplicaciones. Ello simplifica la expresión 2.2 llegando a la siguiente igualdad:

$$\alpha + \rho = 1 \quad [\text{sólidos, líquidos}] \quad (2.3)$$

Por el contrario, los gases presentan una reflectancia prácticamente nula ($\rho = 0$), lo que da lugar a la relación 2.4:

$$\alpha + \tau = 1 \quad [\text{gases}] \quad (2.4)$$

Hay que señalar que α , τ y ρ son funciones de la longitud de onda, o, equivalentemente, del número de onda: $\alpha = \alpha(\nu)$ ¹, etc.

2.2.3. Leyes fundamentales de radiación en el infrarrojo

Cualquier cuerpo que se encuentre a una temperatura superior a la del cero en escala absoluta, esto es, 0 K , emitirá ondas electromagnéticas. La **ley de Planck** es la encargada de predecir la distribución espectral de dicha radiación en función de la temperatura, siempre y cuando el objeto radiante se comporte como un cuerpo negro perfecto (es decir, absorba toda la radiación que le llegue: $\alpha = 1$, $\forall \nu$):

$$\mathcal{L}_{CN}(\nu, T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (2.5)$$

En esta expresión \mathcal{L}_{CN} representa la radiancia característica de un emisor cuerpo negro, T es la temperatura a la que se encuentra el objeto radiante, h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz y k es la constante de Boltzmann. En el caso de un cuerpo no negro, la radiación espectral viene dada por:

$$\mathcal{L}(\nu, T) = \mathcal{L}_{CN}(\nu, T) \cdot \varepsilon(\nu) \quad (2.6)$$

donde ε es la emisividad, que representa la ratio o comparación entre la radiación teórica de cuerpo negro y la que tiene lugar en la práctica. La emisividad sólo puede tomar valores entre 0 y 1, de forma que a una temperatura dada, la máxima radiación emitida

¹A menudo trabajaremos con $\nu = \frac{1}{\lambda}$, que es lo que entenderemos por número de onda, a diferencia de la magnitud $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, que representa el número de onda angular o circular.

la proporciona un cuerpo negro, que tiene $\varepsilon = 1$. La ley de Kirchoff especifica que, bajo la condición de equilibrio local termodinámico (LTE, en nomenclatura anglosajona), la cantidad de energía absorbida y emitida han de coincidir, lo que implica que $\alpha = \varepsilon$. En particular, esto significa que las ecuaciones 2.3 y 2.4 resultan en:

$$\varepsilon + \rho = 1 \Rightarrow \varepsilon = 1 - \rho \quad (2.7)$$

$$\varepsilon + \tau = 1 \Rightarrow \varepsilon = 1 - \tau \quad (2.8)$$

Este último resultado será de gran utilidad para la construcción de modelos de transferencia radiativa a lo largo de este trabajo. Y nos lleva a poder clasificar diferentes tipos de radiadores en función de las propiedades de su emisividad, donde distinguiremos:

- **Cuerpo negro o radiador perfecto.** Cuando su emisividad es igual a 1 a lo largo de todas las longitudes de onda. En este caso, la radiación emitida por este tipo de superficies viene dada simplemente por la ley de Planck a la temperatura a la que se encuentren.
- **Cuerpo gris.** Cuando su emisividad es menor que uno pero constante en todo el ancho espectral ($\varepsilon < 1$).
- **Cuerpo selectivo.** Cuando la emisividad no presenta un único valor para toda la región espectral, sino que presenta una dependencia con la longitud de onda.

En la práctica, la gran mayoría de superficies presentan diferentes valores de emisividad en función de la longitud de onda e incluso de la temperatura a la que se encuentren. En sólidos y líquidos, dichas diferencias generalmente no son muy acusadas y se producen de forma suave (es el caso de la piel humana y de un gran número de pinturas o plásticos), por lo que pueden considerarse aproximadamente grises. De otro lado se encuentran los compuestos gaseosos, que presentan un comportamiento inherentemente selectivo en frecuencia, con cambios de emisividad extremadamente abruptos ("líneas de absorción-emisión") confinados exclusivamente a ciertas regiones espectrales características de cada gas, que es lo que tradicionalmente se ha denominado como *firma espectral*, y que ya anticipamos permitirá su detección e identificación.

La forma de la distribución espectral de la Ley de Planck se muestra en la figura 2.3, en escala log-log, y se aprecia que la longitud de onda de máxima radiación se ve desplazada hacia longitudes de onda menores conforme la temperatura aumenta. Este efecto viene caracterizado por la ley de **desplazamiento de Wien** que predice la longitud de onda a la que se producirá la máxima radiación para una temperatura dada:

$$\lambda_{pico} \cdot T = 2,898 \cdot 10^3 \mu m \cdot K \quad (2.9)$$

Por otro lado la integral de la ley de Planck para todo el rango de longitudes de onda, expresada en exitancia (esto es, la densidad de potencia por unidad de área W/m^2) viene dada por la **ley de Stefan-Boltzmann**:

$$E = \int_0^{+\infty} \mathcal{L}_{CN}(\nu, T) d\lambda = \sigma \cdot T^4 \quad (2.10)$$

siendo $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 \cdot K^4}$. Esta ley nos indica que la intensidad de radiación de un cuerpo es proporcional a la cuarta potencia de su temperatura, por lo que pequeños cambios de ésta producirán grandes cambios en la radiancia observada. Esta acentuada dependencia de la emisión con la temperatura es el motivo por el cual los dispositivos de imagen infrarrojos son capaces de alcanzar resoluciones del orden de mK en la medición de temperaturas, de forma no invasiva.

Una última consideración sobre las fuentes de emisión infrarroja consiste en el hecho de poder considerar la mayoría de cuerpos negros ($\varepsilon = 1$) y grises ($\varepsilon < 1$) como **superficies lambertianas**, en las que la exitancia sigue una distribución cosenoidal de tipo $E = E_0 \cos \theta$ (siendo θ el ángulo medido respecto de la normal). Lo que, en términos de radiancia observada, equivale a decir que ésta es independiente de los ángulos de emisión y observación. Podemos considerar lambertianas a la mayor parte de pinturas, plásticos, telas, la propia piel humana o demás superficies sin barnizar, por lo que las temperaturas obtenidas en termografía serán en todos estos casos independientes del ángulo de observación, dado que, como veremos en la sección 2.4.3, es la radiancia la magnitud a la que responden las cámaras infrarrojas.

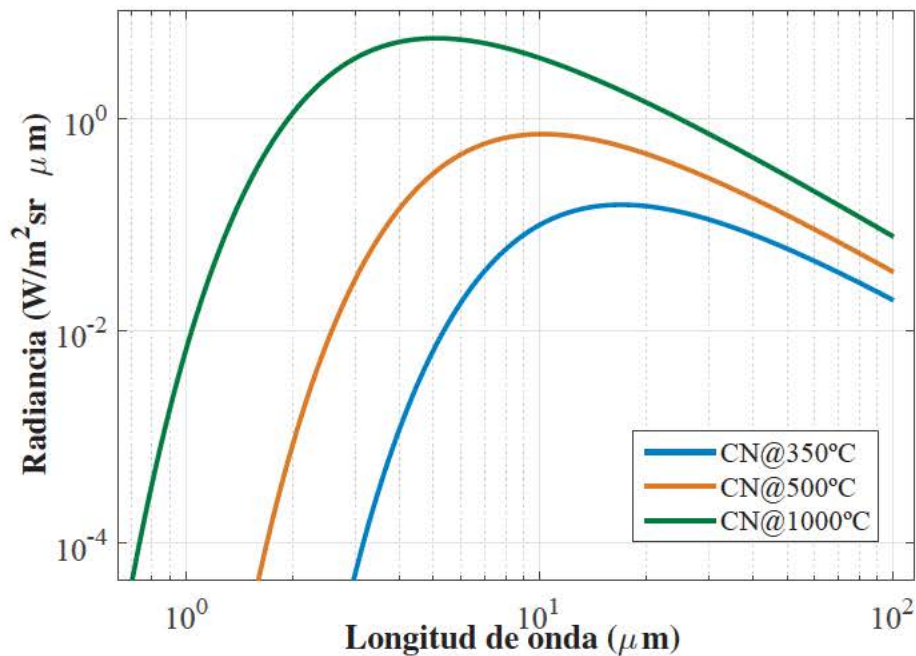


Figura 2.3: Ejemplo de la distribución espectral de distintas radiancias de cuerpo negro a diferentes temperatura.

2.3. Ley de Bouguer-Lambert-Beer. Ecuación de transferencia radiativa

La radiación infrarroja interaccionará con los distintos medios que se encuentre a su paso. En el caso particular de los medios gaseosos, como la atmósfera, la energía propagada se ve alterada por dos mecanismos fundamentalmente: la absorción del medio y la emisión espontánea de flujo radiante, ya que consideraremos despreciable el fenómeno de *scattering*.

Sin embargo, no todos los gases interactúan con la radiación infrarroja, sino únicamente aquellos que posean bandas de emisión o absorción en dicha región. Estas bandas se originan por los momentos vibro-rotacionales [2] de los enlaces que componen la molécula del gas de interés y, tienen, para cada gas, una estructura característica, denominada *firma espectral*. Existe pues una *firma infrarroja* particular asociada a cada compuesto que puede emplearse para su identificación. Ejemplos típicos de compuestos con firma infrarroja [5] son la práctica totalidad de las moléculas polares, como el dióxido de carbono (CO_2), el monóxido (CO), los hidrocarburos (C_xH_x), óxidos de nitrógeno (NO_x), óxidos de azufre (SO_x) o COV's (Compuestos Orgánicos Volátiles), entre muchos otros. Los compuestos en cuyas moléculas no aparece momento dipolar carecen de firma espectral en las bandas IR; destaca el nitrógeno (N_2), que representa aproximadamente el 80 % de la atmósfera, el oxígeno (O_2) que respiramos, y todos los gases nobles.

2.3.1. Ley de Bouguer-Lambert-Beer

La ley de Bouguer-Lambert-Beer [52], denotada según el orden cronológico de sus principales contribuyentes, gobierna la fracción de radiación absorbida por un medio a una frecuencia espectral dada. Siguiendo el esquema de la figura 2.4, la radiancia absorbida dL_{abs} por el diferencial de camino óptico atravesado dx , es función de la radiación incidente L_0 , y viene determinada por la expresión 2.11, donde se ha omitido la dependencia espectral, al igual que en el resto del desarrollo. En esta ecuación σ , en unidades de m^2 , es la sección eficaz o *cross section* de cada molécula, mientras que n es la densidad volumétrica de partículas, en unidades de m^{-3} .

$$dL_{abs} = -\sigma n L_0 dx \quad (2.11)$$

Integrando a lo largo de todo el camino óptico (D en la figura 2.4), la expresión de Lambert-Beer para la transmitancia τ resulta en:

$$\tau(\nu) = e^{-\sigma(\nu)nD} \equiv e^{-a(\nu)cD} \equiv e^{-\kappa(\nu)D} \quad (2.12)$$

siendo a la *absortividad* y c la concentración del gas de interés en el medio. El producto de ambas variables (a y c) se conoce como *coeficiente de absorción*, denotado por κ .

2.3.2. Ecuación de transferencia radiativa

Cuando la radiación atraviesa un medio, éste no sólo absorbe el haz luminoso, sino que también contribuye a él mediante la emisión térmica de fotones. Bajo la condición

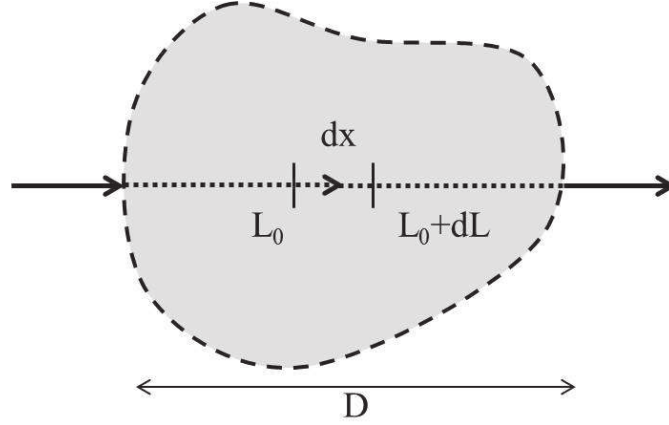


Figura 2.4: Representación gráfica de la absorción de un medio modelada a partir de la ley de Beer-Lambert.

de equilibrio local termodinámico (LTE), la variación de la radiancia debida a la emisión puede expresarse como:

$$d\mathcal{L}_{emis} = \mathcal{L}_{CN} \cdot d\varepsilon \quad (2.13)$$

donde $d\varepsilon$ es la emisividad de la sección correspondiente al recorrido diferencial dx .

Bajo LTE, la ley de Kirchoff impone que $d\varepsilon = d\alpha$. Como $\alpha = 1 - \tau$, y dado que sabemos que la transmitancia viene dada por $\tau = e^{-\sigma ndx} \approx 1 - \sigma ndx$ es posible expresar la radiancia emitida como $d\mathcal{L}_{emis} = \mathcal{L}_{CN}\sigma ndx$. Entonces la variación total de radiancia debida a los fenómenos de absorción y emisión resulta en la expresión 2.14, denominada *ecuación de transferencia radiativa* [126]:

$$d\mathcal{L} = -\sigma n(\mathcal{L}_0 - \mathcal{L}_{CN})dx = -\kappa(\mathcal{L}_0 - \mathcal{L}_{CN})dx \quad (2.14)$$

En la práctica resulta más cómodo trabajar con la versión integral de la ecuación de transferencia radiativa sobre una determinada porción x de camino óptico. Si reescribimos la expresión 2.14 como $\frac{d\mathcal{L}}{dx} + \kappa\mathcal{L} = \kappa\mathcal{L}_{CN}$, multiplicamos todos los términos por $e^{\int_0^x \kappa dx'}$ [115] (pag. 63), operamos y agrupamos términos, obtendremos la radiancia total resultante $\mathcal{L}(x)$ como [126]:

$$\mathcal{L}(x) = \mathcal{L}_0 e^{-\int_0^x \kappa dx'} + \int_0^x \kappa \mathcal{L}_{CN}(T(x')) (e^{-\int_0^{x'} \kappa dx''}) dx' \quad (2.15)$$

Donde se ha considerado que el camino óptico atravesado presenta un perfil de temperaturas arbitrario ($T(x)$), y de nuevo se ha omitido la dependencia espectral de todos los términos. En aquellos casos en los que la temperatura y la concentración del medio puedan considerarse uniformes ($T(x) = T_0$, $\kappa(x) = \kappa$), la expresión anterior se simplifica en gran medida, resultando en:

$$\mathcal{L}(x) = \mathcal{L}_0 e^{-\kappa x} + \mathcal{L}_{CN}(T_0) \cdot (1 - e^{-\kappa x}) \quad (2.16)$$

Como $e^{-\kappa x} = \tau(x)$, el primer término es la contribución a la radiación incidente debida a la radiación *transmitida* por el medio, y el segundo es la contribución debida a la

radiación *emitida* por el medio. Vemos que esta se calcula simplemente atribuyendo a la superficie del medio, a temperatura T_0 , una emisividad $\varepsilon = 1 - \tau$. Por tanto, en un medio homogéneo bastaría para describir su comportamiento el conocer su transmitancia. Esta es fácilmente generalizable a medios con múltiples especies absorbentes (y emisoras): en general, para M componentes la resultante de las respectivas transmitancias se indica en la expresión 2.17, en la que a es la absorptividad y $Q \equiv c \cdot x$ se define como la densidad de columna, esto es, la cantidad de gas que la radiación encuentra a su paso, en unidades de concentración por camino óptico, $\% \cdot m$ o $ppm \cdot m$.

$$\tau(\nu) = e^{-\sum_{k=1}^M a_{v,k}(\nu) \cdot Q_k} \quad (2.17)$$

2.3.3. Influencia de la temperatura en el coeficiente de absorción

Hasta ahora no se ha considerado de forma explícita la influencia de la temperatura en la firma espectral, o equivalentemente, en el coeficiente de absorción $\kappa(\nu)$. Sin embargo, su efecto se traduce en cambios sustanciales tanto en la intensidad de cada línea de absorción como en su distribución espectral. Este efecto puede comprobarse en la figura 2.5, en la que se representa la absorptividad (o, equivalentemente, el coeficiente de absorción para una concentración del 100 %) del CO_2 en el infrarrojo medio para dos temperaturas, de 300K y 430K respectivamente. En este caso, un aumento de la temperatura se corresponde con una disminución de la intensidad y un ensanchamiento de las líneas de absorción.

Ambos coeficientes de absorción de la figura 2.5 han sido calculados a partir de las herramientas suministradas por la base de datos espectroscópicos HITRAN 2012 (*HIGH-resolution TRANsmision molecular absorption database*) [107], la cual provee rutinas para la generación de coeficientes de absorción en distintas condiciones. Además existen versiones web y servidores que pueden accederse desde librerías Python.

Sin ánimo de profundizar en los fundamentos teóricos que establecen los parámetros espectroscópicos de las moléculas gaseosas, es necesario señalar que la intensidad de línea S_{ij} asociada a la transición entre dos estados energéticos i y j , $\Delta E = E_i - E_j = \nu_{ij}$, presenta una dependencia implícita con la temperatura, como se muestra en la ecuación 2.18, donde esta aparece tanto en el numerador como en el denominador, a través de la *función de partición* $Q(T)$. Es posible encontrar una descripción exhaustiva tanto de dicha función como del resto de parámetros intervinientes (I_a , A_{ij} , c_2 , g_k) en [107].

$$S_{ij} = I_a \frac{A_{ij}}{8\pi c \nu_{ij}^2} \frac{g' e^{-\frac{c_2 E_i}{T}} (1 - e^{-\frac{c_2 \nu_{ij}}{T}})}{Q(T)} \quad (2.18)$$

$$Q(T) = \sum_k g_k e^{-\frac{c_2 E_k}{T}} \quad (2.19)$$

Otra alternativa consiste en calcular la intensidad de línea (S_{ij}) a diferentes temperaturas una vez conocido su valor a la temperatura de referencia de 296K, aplicando la siguiente expresión:

$$S_{ij}(T) = S_{ij}(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref})}{Q(T)} \frac{e^{-c_2 \frac{E''}{T}}}{e^{-c_2 \frac{E''}{T_{ref}}}} \frac{\left[1 - e^{-\frac{c_2 \nu_{ij}}{T}}\right]}{\left[1 - e^{-\frac{c_2 \nu_{ij}}{T_{ref}}}\right]} \quad (2.20)$$

Sin embargo, la influencia de la temperatura en el coeficiente de absorción no se reduce al efecto de ésta en las intensidades de línea, ya que dicho coeficiente es una función continua en ν dependiente de las condiciones de presión y temperatura a través de una función de forma $f(\nu; \nu_{ij}, T, p)$, como se expresa en la ecuación 2.21.

$$k_{ij}(\nu, T, p) = S_{ij}(T) f(\nu; \nu_{ij}, T, p) \quad (2.21)$$

La función de forma $f(\nu; \nu_{ij}, T, p)$ representa el perfil de ensanchamiento que modela el comportamiento de las líneas de absorción para cada presión y temperatura. Es habitual seleccionar un perfil de ensanchamiento de tipo Voigt, caracterizado por la convolución de un perfil gaussiano $f_G(\nu; \nu_{ij}, T, p)$, que incorpora el ensanchamiento debido al efecto Doppler, y un perfil de tipo lorentziano $f_L(\nu; \nu_{ij}, T, p)$, que introduce los efectos relativos a la presión.

Ambos perfiles incluyen una dependencia directa con la temperatura, lo que unido a la dependencia en las intensidades de las líneas, pone de manifiesto la complejidad de reproducir mediante un software de modelización coeficientes de absorción a temperaturas arbitrarias, tal y como haremos a lo largo del capítulo 5.

2.4. Sistemas de imagen infrarroja

En esta sección se describirán los diferentes elementos que conforman un sistema de adquisición de imagen infrarroja convencional. En el caso de dispositivos más complejos, especialmente en lo referido a sus capacidades para la selección espectral, será necesario acudir a la descripción de sistemas adicionales, como ruedas portafiltros, redes de difracción o interferómetros; estos últimos serán tratados a lo largo del capítulo 4.

Comenzaremos aludiendo al esquema de la figura 2.6, donde se describen los principales procesos que se desarrollan desde la captación del haz de radiación por el sistema óptico hasta conformar la imagen digital. Distinguiremos los elementos que se enumeran a continuación:

- **Sistema óptico.** Es el elemento encargado de enfocar la energía incidente sobre el detector. Puede estar compuesto por una o varias lentes de diversos tipos, así como de capas de recubrimiento que tratan bien de eliminar la radiación espúrea y los posibles reflejos internos, o bien de dotar al sistema de una mayor robustez y durabilidad frente a posibles inclemencias externas (es el caso de los recubrimientos DLC (*Diamond-Like Coating*) [33]). Para nuestro propósito nos sirve el destacar los siguientes parámetros:
 - *Pupila de entrada.* Se define como el elemento que limita la extensión de los rayos que, partiendo del objeto, atraviesan la lente. La caracterizaremos por su diámetro D_{pe} .

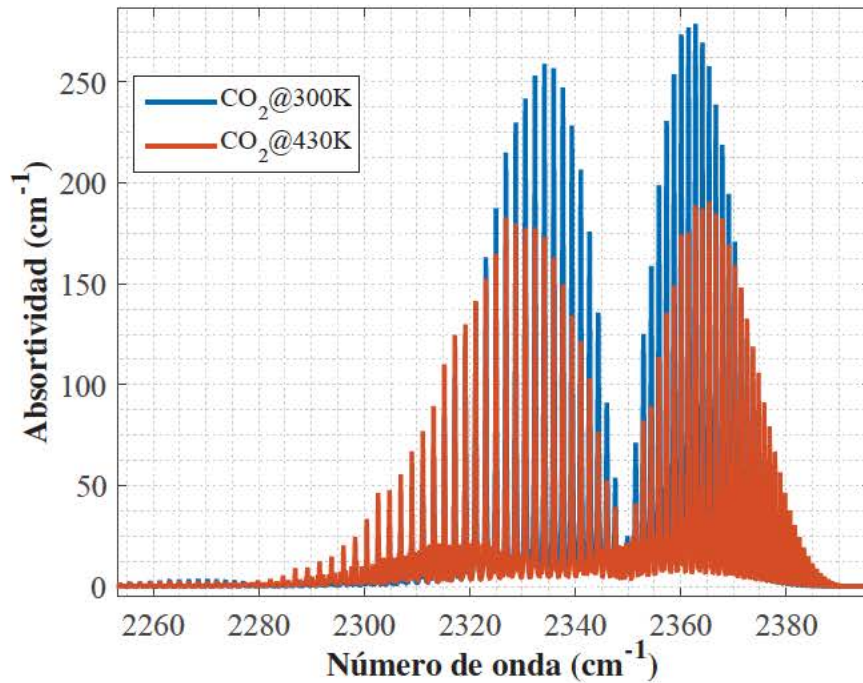


Figura 2.5: Ejemplo de influencia de la temperatura en la absortividad, para el caso del CO_2 . La absortividad tiene como dimensión física la inversa de la longitud siempre y cuando la concentración se mida como fracción molar.

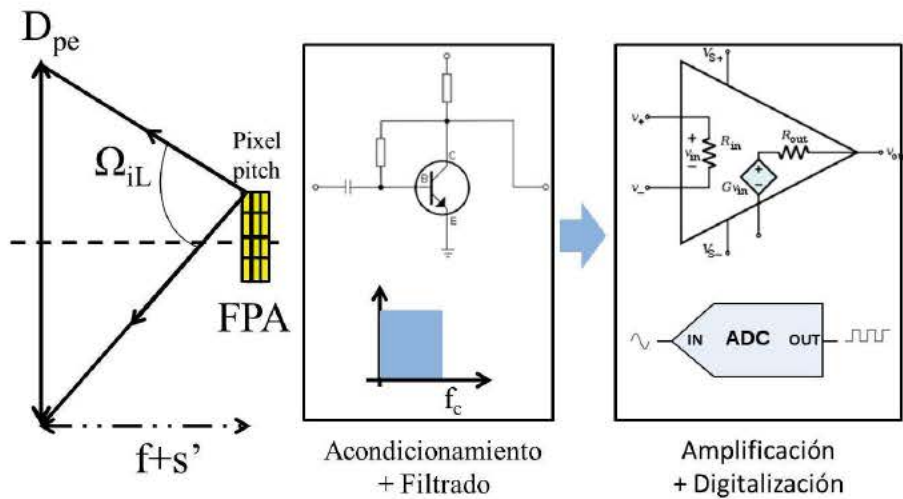


Figura 2.6: Esquema de detección, a modo de diagrama de bloques, con los principales elementos de un sistema de imagen infrarroja: sensor, óptica, electrónica de acondicionamiento, etc.

- *Distancia focal (f)*. Definida como la distancia desde el centro de la lente al punto donde convergen los rayos que inciden paralelos al eje óptico. En sistemas complejos con múltiples lentes el centro de la lente no es fácil de determinar, por lo que suele especificarse la denominada como *back focal distance*, que define la distancia entre la cara trasera del sistema óptico y el punto donde se focalizan los rayos. Esto facilita el montaje mecánico del elemento detector y dicha distancia suele definirse en los estándares de montaje más habituales como en el caso de *C-mount* o *CS-mount*.
- *Número F ($\#F$)*. Viene determinado por la siguiente relación entre la distancia focal y la pupila de entrada:

$$\#F = \frac{f}{D_{pe}} \quad (2.22)$$

Cuanto menor sea dicho valor mayor será la cantidad de energía que atravesará el sistema óptico y viceversa. Sin embargo, emplear un número F pequeño, al margen de los costes y dificultades asociadas, también introduce un mayor nivel de aberraciones, por lo que su elección suele ser un parámetro crítico en cualquier sistema de imagen.

- **Detector.** Este elemento constituye la parte fundamental de todos los sistemas de adquisición, ya que será el encargado de convertir la radiación electromagnética incidente en una magnitud electrónica que podremos medir y procesar. El mecanismo de transducción así como la tecnología empleada dependen en gran medida de la región espectral, tal y como explicaremos de forma más detallada en la siguiente sección. Con el fin de construir imágenes, los detectores descritos se disponen de forma matricial en el plano focal dado por el sistema óptico, denominándose por eso arrays de plano focal (*Focal Plane Array*, FPA). Al contrario que sus predecesores, los sistemas de barrido, esta tecnología no requiere de partes móviles para lograr la adquisición de la imagen, sino que ésta se realiza de forma electrónica mediante circuitos de lectura. El formato de estos arrays suele ser rectangular, con dimensiones típicas de 320x256, 512x480 o, más recientemente, 1024x640 para sistemas de gran formato. La distancia entre centros para dos elementos consecutivos es lo que se denomina *pixel pitch*, que se corresponderá con el área de cada detector individual en la medida en que se utilice un *factor de llenado* próximo al 100 %.
- **Electrónica de proximidad.** Compuesta por la electrónica de lectura y acondicionamiento. Será la encargada de amplificar y acondicionar la magnitud medida por el detector (habitualmente corriente). Dicha amplificación supone un aumento de la sensibilidad de nuestro sistema, por lo que se podrán mejorar de forma sustancial sus prestaciones. Aparte de esto, el acondicionamiento de señal permite realizar muchas más operaciones. Podremos realizar tareas como:
 - Eliminación de fuentes de error o de offset constantes mediante variaciones de los niveles de referencia del circuito acondicionador. Esta etapa también se denomina *skimming*.

- Disminución de la potencia de ruido mediante la utilización de filtrado electrónico paso banda o paso bajo. Este filtrado tiene como objetivo disminuir el ancho de banda equivalente de ruido, disminuyendo así la potencia de éste.
 - Variación del ancho de banda de trabajo o del tiempo de respuesta del circuito electrónico, ya que suele ser el elemento limitante.
 - Selección del tiempo de integración de la señal medida. Esta magnitud es equivalente al tiempo de obturación en los sistemas de imagen visible. De este valor dependerá en gran medida el rango dinámico de nuestro sistema y su relación señal a ruido.
- **Conversión A/D.** Para su posterior procesado y manipulación deberemos convertir la magnitud medida a un esquema digital, para ello son varias las opciones de las que se dispone: conversores flash, de aproximaciones sucesivas, sigma-delta o doble rampa entre otros.

2.4.1. Detectores infrarrojos

Los fabricantes de cámaras infrarrojas implementan dos tipos de detectores claramente diferenciados: refrigerados y no refrigerados. Los *detectores refrigerados* (denominados así por el uso de un refrigerador criogénico, que baja la temperatura del array de detectores hasta situarla alrededor de 80 K) se caracterizan por una gran sensibilidad a la radiación infrarroja, consiguiéndose detectividades muy elevadas (ver ejemplos de *arrays* en figura 2.7). El refrigerador criogénico reduce de forma sustancial el ruido térmico, eliminando gran parte de la radiación incidente no asociada a los objetos que se desean observar. Los materiales más comunes que se emplean en este tipo de detectores son el Antimoniuro de Indio (InSb) y los de tipo ternario, en particular los de MCT (que emplean una aleación de Mercurio, Cadmio y Telurio (HgCdTe)), así como aquellos basados en tecnología QWIP (*Quantum Well Infrared Photodetector*).

Frente a esta tecnología, los *detectores no refrigerados* (o térmicos) se han convertido recientemente en una gran alternativa, y son mucho más usados en la mayoría de cámaras infrarrojas en los ámbitos militar, industrial o comercial, especialmente en el ámbito de la termografía convencional. Dado que no requieren de una etapa de refrigeración criogénica, estos dispositivos consiguen una fuerte reducción de la complejidad, tamaño y coste, además de tiempos de vida más elevados y la posibilidad de trabajar de forma ininterrumpida durante largos periodos. Pese a que no requieren de refrigeración, es habitual que sí precisen de estabilización térmica mediante dispositivos TEC (*Thermo Electric Cooler*), o bien implementen mecanismos de compensación basados en la monitorización de la temperatura, bien a partir de resistencias RTD (*Resistance Temperature Detector*) o de detectores ciegos.

El tipo más extendido de detector no refrigerado es el array de microbolómetros, que consiste en un dispositivo basado en tecnología micro-electro-mecánica (MEMS). El principio de funcionamiento en el que se basan es el siguiente: cuando la radiación infrarroja (especialmente aquella procedente del infrarrojo térmico) incide sobre la superficie detectora del microbolómetro es absorbida por éste, lo que provoca un cierto calentamiento que induce cambios en su resistencia eléctrica susceptibles de ser medidos y procesados

posteriormente. Los materiales más populares empleados en este tipo de detectores no refrigerados son el Silicio Amorfo ($\alpha - Si$) y el óxido de vanadio (VO_x).

En general, los detectores refrigerados se caracterizan por una sensibilidad muy selectiva en términos espectrales, mientras que típicamente los detectores no refrigerados tienden a presentar una respuesta espectral plana (si bien una excepción a esta regla viene dada por los detectores microbolómetros, que emplean cavidades para adaptar la absorción de radiación en determinadas bandas espectrales).

Independientemente de la tecnología empleada (sea ésta refrigerada o no), los detectores deben responder de forma lineal con la irradiancia incidente sobre ellos (y consecuentemente con la radiancia), lo que facilita su posterior calibración y/o uniformización.

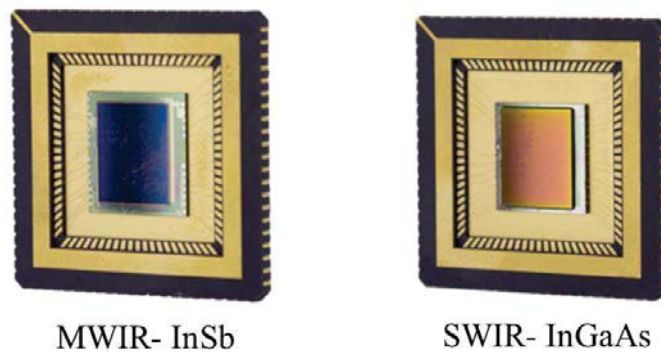


Figura 2.7: Ejemplos de detectores infrarrojos en formato FPA, para las regiones del infrarrojo medio y SWIR, respectivamente. Ilustración adaptada de [25].

2.4.2. Figuras de mérito

Una vez que ya se han descrito los principales componentes (óptica, array de detectores, electrónica de proximidad, etc.) e introducido los conceptos de radiometría fundamentales, es posible pasar a explicar las *figuras de mérito* que nos permitirán comparar y evaluar las principales características de los sistemas de imagen infrarroja. Algunas de ellas son comunes también en otros ámbitos, especialmente en los sistemas de imagen que operan en la banda electro-óptica o visible, mientras que otras son específicas para el IR. Entre todas ellas hemos seleccionado las principales para nuestro trabajo:

- **Rango dinámico.** Se suele expresar como la ratio entre la mayor y menor señal que pueden detectarse en un mismo instante de tiempo, esto es, sin superar los límites de ruido y saturación del equipo.
- **Responsividad.** Habitualmente se define como el cociente entre la señal de salida eléctrica (en general, corriente, I_{gen}) frente a la potencia asociada a la radiación incidente P_{inc} a la que es sometido el detector. Aunque esta definición es posible extenderla de forma que abarque etapas posteriores de procesado, lo más común es emplear la expresión 2.23.

$$R = \frac{I_{gen}}{P_{inc}} [A/W] \quad (2.23)$$

También es frecuente extender dicha definición incluyendo la dependencia con la longitud de onda, denominándose entonces responsividad espectral o respuesta espectral.

- *Potencia de ruido equivalente o NEP (Noise Equivalent Power)*. Se define como la potencia incidente en nuestro sistema tal que se obtenga una relación señal a ruido igual a la unidad en el detector. Se trata de una medida de ruido, aunque expresada en términos de potencia a la entrada:

$$NEP = \frac{N}{R_T} \quad (2.24)$$

En esta ecuación, N representa el ruido bajo consideración (I_{rms} en el caso de corriente) y R_T el factor de responsividad total entre la entrada y la salida. En el ruido N se engloban todas aquellas contribuciones ajenas al objetivo de la medida, incluyendo todas las fuentes de ruido que podrían reducirse mediante una mejora en el diseño (interferencias electromagnéticas, derivas térmicas,...) junto con otras asociadas al sistema detector, como el ruido térmico, *shot*, de tipo *flicker*, de oscuridad o el espacial, y también el provocado por fluctuaciones temporales de las fuentes de emisión.

- *Detectividad específica o D^** . Puesto que la NEP depende tanto del ancho de banda (Δf) como del área del detector (A_D), surge la necesidad de crear una magnitud independiente de ambas que nos permita comparar diferentes detectores. Esto se consigue definiendo la detectividad específica de este modo [49]:

$$D^* = \frac{\sqrt{A_D} \cdot \sqrt{\Delta f}}{NEP} \quad (2.25)$$

La razón es que el ruido es generalmente proporcional a $\sqrt{\Delta f}$ y a $\sqrt{A_D}$, y se pone en el denominador para que valores de D^* mayores indiquen mejores detectores. De esta forma se consigue una magnitud que permite la comparación de diferentes tecnologías de fabricación de detectores. En la figura 2.8 podemos encontrar la detectividad específica de los materiales detectores más habituales, representada en función de la longitud de onda y considerando su temperatura de operación.

- *Diferencia de temperatura equivalente de ruido o NETD (Noise Equivalent Temperature Difference)*. Esta es una de las figuras más empleadas y características del tipo de sensores que nos ocupa, especialmente en ámbitos como la termografía. En esencia, se trata simplemente de una forma de expresar el ruido de nuestro sistema visto desde la entrada a éste, y a través de una unidad más natural y fácil de interpretar como es la temperatura. En esta definición se expresa el ruido medido como el mínimo incremento con respecto a una temperatura de referencia (normalmente el ambiente) que el equipo es capaz de discriminar, referido a un ancho de banda espectral determinado, un valor de apertura numérica o número $\#F$ (típicamente unitario) y un valor de tasa de adquisición de imágenes determinado. Pese a que se trata de una magnitud que normalmente se caracteriza de forma empírica, también

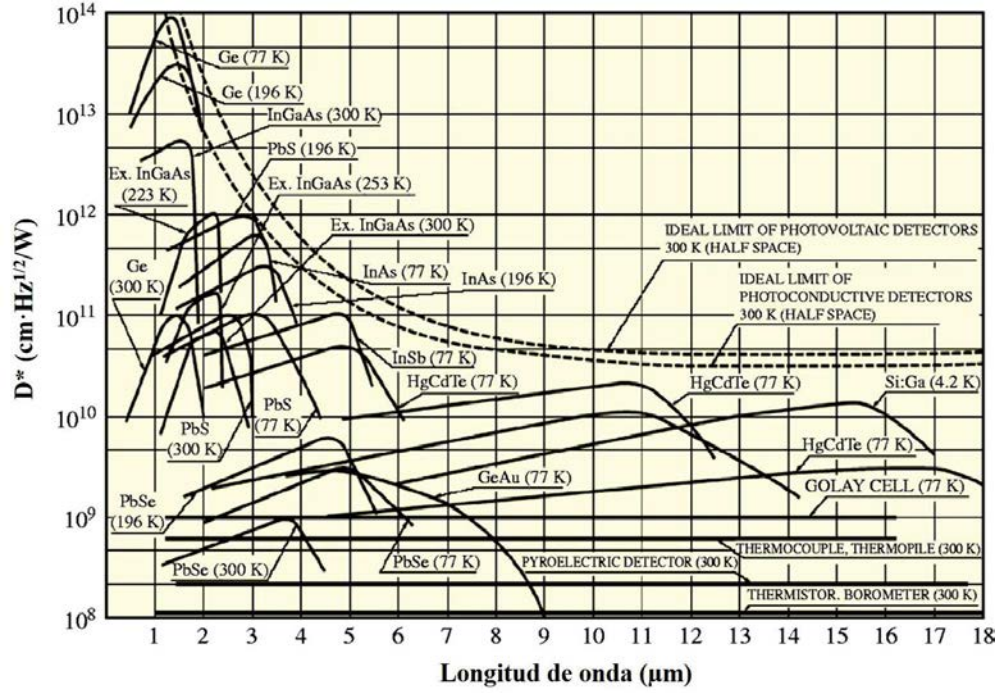


Figura 2.8: Detectividad específica en función de la longitud de onda para distintos tipos de materiales detectores. Ilustración adaptada de [139].

es posible estimar su valor mediante la ecuación propuesta en 2.26 [47].

$$\text{NETD} = \frac{\text{NEP}}{\frac{\partial P_{inc}}{\partial T}} = \frac{4F^2}{\tau_T \cdot \pi} \sqrt{\frac{\Delta f}{A_d}} \frac{1}{\int_{\langle \Delta \lambda \rangle} \frac{\partial L(T, \lambda)}{\partial T} D^*(\lambda) d\lambda} \quad (2.26)$$

En la ecuación anterior, Δf hace referencia al ancho de banda temporal, sintonizado en los circuitos de pre-procesado y adaptado a la tasa de frames por segundo máxima disponible, motivo por el que la NETD suele llevar especificada la frecuencia en Hz a la que ha sido evaluada; τ_T es la transmitancia total de todos los subsistemas, como la óptica, filtros interferenciales si los hubiera u otros; y n representa el número de imágenes empleado, asumiéndose que todas ellas serán promediadas.

- **Modulation Transfer Function (MTF).** Un sistema de imagen puede ser entendido como un proceso de muestreo espacial, por el cual se traslada la escena observada (de naturaleza continua) a las señal proporcionada por el array (discreto) de detectores. Lo que, de entrada, supone que existirá una frecuencia espacial máxima ($f_{Nyquist} \geq f_{max}$) recuperable asociada al periodo de muestreo, dado por el tamaño y la separación entre píxeles. Además del muestreo, elementos como el sistema óptico o efectos como el desenfoque introducen una degradación adicional, limitando aún más las prestaciones finales del equipo. Si dispusiéramos como entrada del sistema de una distribución tipo delta de Dirac bidimensional, el sistema de imagen recogería lo que se conoce como PSF o *Point Spread Function*, que traducida al

dominio frecuencial proporciona la conocida como función de transferencia óptica u OTF, cuyo módulo es la función de transferencia de modulación o MTF [49]. Esta última representa la ratio entre el contraste o modulación generado por el sistema de imagen frente al originario de la escena, para cada frecuencia espacial.

Existen distintos procedimientos para estimar este parámetro, desde medidas del contraste con miras a distintas frecuencias hasta normativa ISO para el cálculo a través de bordes (*Edge Spread Function*) y funciones de línea (*Line Spread Function*). En la figura 2.9 se incluye un ejemplo de estimación experimental de la MTF para un sistema telescópico de gran distancia focal en el infrarrojo medio.

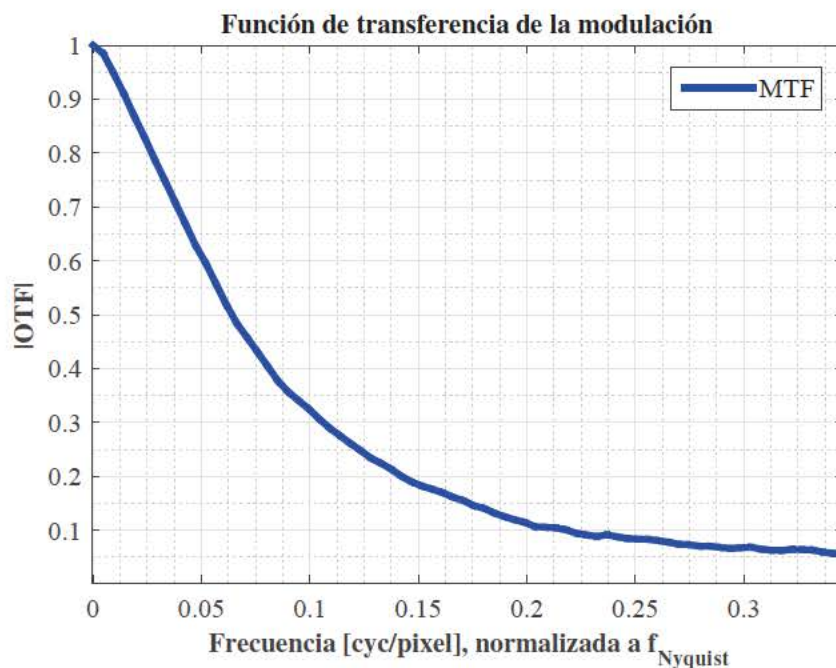


Figura 2.9: Determinación experimental de la MTF para un sistema óptico de gran complejidad, formado por la concatenación de un telescopio Cassegrain (3.5x), un sistema de aumentos 2.5x y una lente de distancia focal 100 mm.

- *Minimum Resolvable Temperature Difference (MRTD)*. Es la figura que aúna la resolución espacial y radiométrica, y una de las más empleadas en el ámbito de la detección infrarroja de blancos, como en sistemas de vigilancia militar, dado que sintetiza todas las variables con influencia en las prestaciones del sistema. Algunos autores, como en [79] o en [47], llegan a incluir las prestaciones del sistema de visualización empleado, así como las anomalías visuales del observador, mediante técnicas basadas en los criterios de Johnson [57] aplicadas al reconocimiento de una mira de Foucault (4 barras). Por todo ello, la determinación de la MRTD es una tarea eminentemente práctica, y resulta complejo llegar a proporcionar una expresión cerrada que abarque la gran variabilidad de sistemas actual. Holst en [48] proporciona la estimación mostrada en la ecuación 2.27, en la que k no es más un parámetro de proporcionalidad constante, que recoge toda esa variabilidad, y que se sugiere tome

valores entre 0.5 y 2.

$$\text{MRTD}(f) = \frac{k \cdot \text{NETD}}{\text{MTF}_{\text{sys}}(f)} \quad (2.27)$$

En cualquiera de los casos, la MRTD es una función inversamente proporcional a la modulación espacial del sistema $\text{MTF}_{\text{sys}}(f)$ y proporcional a la sensibilidad radiométrica del mismo, NETD.

2.4.3. Los sistemas de imagen como sensores de radiancia

La señal obtenida por cada uno de los píxeles que conforman una imagen es el resultado de aplicar una cierta función de proporcionalidad a la potencia radiante (o flujo Φ) que alcanza el área de cada elemento detector. A su vez, ese flujo es el producto de irradiancia sobre el detector (E_d) por su área: $\Phi = E_d A_d$, y E_d está relacionado con la radiancia \mathcal{L}_d incidente: $E_d = \mathcal{L}_d \Omega_d$, siendo Ω_d el ángulo sólido proyectado por el que llega la radiación al píxel. Dado que la propiedad de invariancia de la radiancia garantiza que \mathcal{L}_d es igual a la radiancia saliente del objeto (suponiendo que no hay pérdidas por absorción o *scattering*), vemos que *la señal en un píxel es proporcional a la radiancia emitida por el correspondiente punto del objeto enfocado*. Es por ello que se suele catalogar a las cámaras infrarrojas como sensores de radiancia.

Podemos mostrar la invariancia de la radiancia (sección 2.2.1) en un caso concreto importante valiéndonos del esquema mostrado en la figura 2.10. En él se representa un caso típico de formación de la imagen de un objeto fuente de radiancia conocida \mathcal{L}_o , a partir de un sistema óptico modelado como una sola lente convergente encargada de focalizar los rayos sobre un array de detectores o píxeles. El área A_i de un detector individual es la imagen del área A_o sobre el objeto. El ángulo que abarca A_o visto desde la lente es el llamado campo de visión instantáneo (iFOV) de la cámara. Si el flujo saliente de A_o recogido por la lente es Φ_{oL} , la radiancia sobre la lente debida a A_o será ²:

$$\mathcal{L}_L = \frac{\Phi_{oL}}{A_L \cdot \text{iFOV}} = \frac{\frac{\mathcal{L}_o A_o A_L}{d_o^2}}{A_L \frac{A_o}{d_o^2}} = \mathcal{L}_o \quad (2.28)$$

Por otra parte, la radiancia sobre el detector será Φ_{oL} dividido por A_i y por el ángulo sólido proyectado Ω_{iL} a través del cual le llega la radiación a A_i :

$$\mathcal{L}_d = \frac{\Phi_{oL}}{A_i \cdot \Omega_{iL}} = \frac{\Phi_{oL}}{\text{iFOV} \cdot d_i^2 \cdot \frac{A_L}{d_i^2}} = \mathcal{L}_L \quad (2.29)$$

Lo que demuestra que la radiancia es la misma en la fuente, la lente y el detector, como prevé la propiedad de invarianza de la radiancia.

Valiéndonos de nuevo del esquema de la figura 2.10, es sencillo expresar la relación entre la irradiancia sobre el detector en términos de las características del sistema óptico (mediante su *número F* y el aumento de la lente m) y la exitancia del objeto. Dado que

²Se han aproximado los ángulos sólidos proyectados considerando la aproximación de ángulos pequeños $\frac{A}{d^2}$; cuando no sea posible se usaría la expresión $\Omega = \pi \sin^2 \Theta$ [138], siendo Θ el semiángulo del cono de rayos.

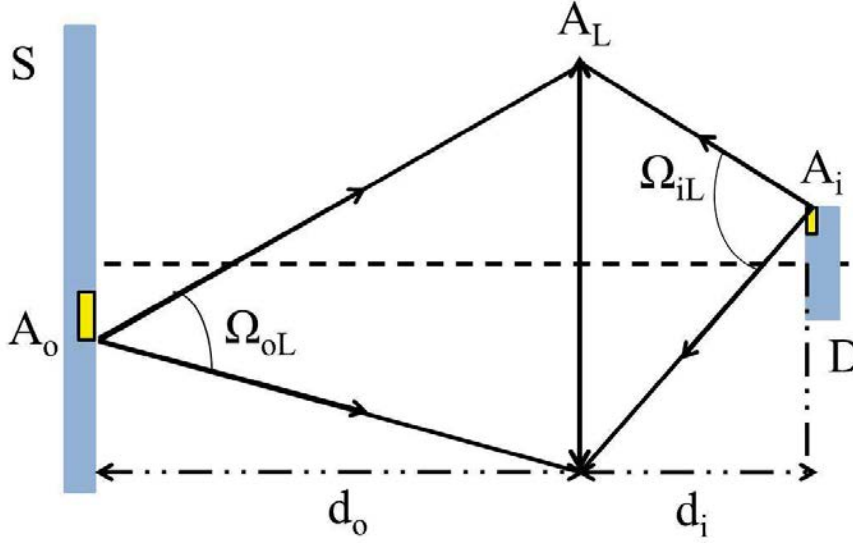


Figura 2.10: Esquema simplificado para la comprobación de la invariancia de la radiancia y para la obtención de la expresión de la irradiancia en cada punto del plano imagen a partir de la radiancia de la fuente.

$d_i = d_o m$ y $\#F = f/2R_L$, siendo R_L el radio de la lente convergente, el ángulo sólido que sustenta cada detector Ω_D resulta (siguiendo la aproximación de ángulos pequeños):

$$\Omega_D \approx \frac{\pi R_L}{d_i^2 m^2} = \frac{\pi f^2}{4(\#F)^2 d_o^2 m^2} \quad (2.30)$$

y la irradiancia será $E_d = \mathcal{L}_d \Omega_d$.

Si además de la invarianza de la radiancia consideramos a la fuente como un emisor lambertiano, obtenemos que $\mathcal{L}_d = \mathcal{L}_o = \frac{M_o}{\pi}$; y sustituimos d_o en función de m y f^3 , podemos expresar la irradiancia sobre el detector, $E_d(y_i)$, de la siguiente forma:

$$E_d(y_i) = \frac{\mathcal{L}_d(y_o) \pi f^2}{4(\#F)^2 (|m| + 1)^2} \quad (2.31)$$

(donde y_i es el punto imagen de y_o). A medida que la distancia al objeto aumenta ($s \rightarrow \infty$), el aumento disminuye ($m \rightarrow 0$), y se alcanza la ecuación que en la mayor parte de casos prácticos gobierna el funcionamiento de una cámara, en la que la irradiancia E_d resulta en:

$$E_d(y_i) = \frac{M_o(y_o)}{4(\#F)^2} \quad (2.32)$$

Esta última expresión explica la independencia entre la radiación medida y la distancia de observación, característica de los sistemas de imagen, además de poner de manifiesto el fuerte impacto del número F en la irradiancia detectada.

³La relación es $d_o = f(1 + |m|^{-1})$.

2.4.4. Termografía infrarroja

La ecuación 2.32 puede considerarse como el fundamento de la termografía IR, ya que implica que la señal registrada en un píxel, que será proporcional a E_d , es a su vez proporcional a la exitancia M_o de la fuente. Como ésta viene dada por la ley de Planck: $M_o = M_o^{CN}(T_o) \cdot \varepsilon_o$, podemos obtener la temperatura del objeto si conocemos su emisividad, o la emisividad si conocemos su temperatura.

Hay que advertir que aquí estamos obviando las complicaciones debidas a los efectos atmosféricos y a la reflexión de radiación ambiente por el objeto. Sin embargo, no alteran la idea esencial: podemos determinar T , pero sólo si conocemos ε . Hay pues un problema de separabilidad entre ε y T , que en los sólidos no suele ser importante porque generalmente se conoce ε con cierta aproximación, pero que aparecerá en toda su magnitud cuando el objeto de la medida sea un gas, como veremos en la siguiente sección.

2.5. Teledetección de gases

Los dispositivos que operan en la banda infrarroja del espectro, y particularmente aquellos que forman imagen, están bien adaptados para tareas que impliquen la teledetección de gases, debido por una parte a la gran sensibilidad espectral y radiométrica que recientemente han alcanzado, y por otra, a los numerosos compuestos gaseosos que presentan firma espectral en dicha banda. Se han empleado en tareas como la detección de agentes químicos (provenientes de tanto desastres naturales como humanos, entornos de guerra química incluidos) o la monitorización de emisiones fugitivas (fugas en plantas industriales o gaseoductos) o controladas (como chimeneas industriales o el tráfico circulante). Frente a los sistemas de detección *in-situ* [81], como por ejemplo los sensores químicos de óxidos de estaño (SnO_2) o los basados en fotoacústica, que requieren extraer una muestra del gas a medir de forma que exista una interacción con el elemento sensible a dicho gas, aquí la radiación infrarroja atraviesa la nube de gases que “imprime” su firma espectral y la traslada a la radiación detectada.

2.5.1. Modelo radiométrico

Ante un escenario en el que se conoce o se sospeche la presencia de gas, el primer paso es identificar qué compuestos se encuentran presentes o, al menos los componentes mayoritarios. Esta tarea viene determinada por la capacidad de selección espectral del sistema de medida, esto es, el número de canales del que dispondremos, dado que identificar un compuesto conlleva conocer su *firma espectral* y, por tanto, establecer una serie de correlaciones en dicho dominio que contribuyen a reducir la ambigüedad. La identificación de especies puede llevarse a cabo a través de la mera inspección del espectro en los casos más simples, o puede llegar a necesitar la ayuda de librerías espectrales, como la ya citada HITRAN [107].

El trabajo desarrollado en esta tesis se centra en una de las etapas posteriores a la detección e identificación: la **cuantificación**; para lo que el primer paso será describir en términos radiométricos un escenario de medida característico. En la figura 2.11 se presenta un sistema de imagen infrarroja, a priori con sensibilidad y resolución espacial y

espectral suficiente en las bandas de emisión del gas objeto, dispuesto de modo que su campo de visión Ω contempla una nube de gases (o “pluma”) situada sobre un determinado fondo (*background*). Este sistema nos dará una señal proporcional a la radiancia espectral recibida por cada píxel, es decir, la limitada por su campo de visión (iFOV) la cual se ve afectada por la transmisión y emisión de energía producida por la nube de gases. Nuestro objetivo último será la **recuperación de los parámetros** de los que depende esa radiancia (temperatura y emisividad fundamentalmente).

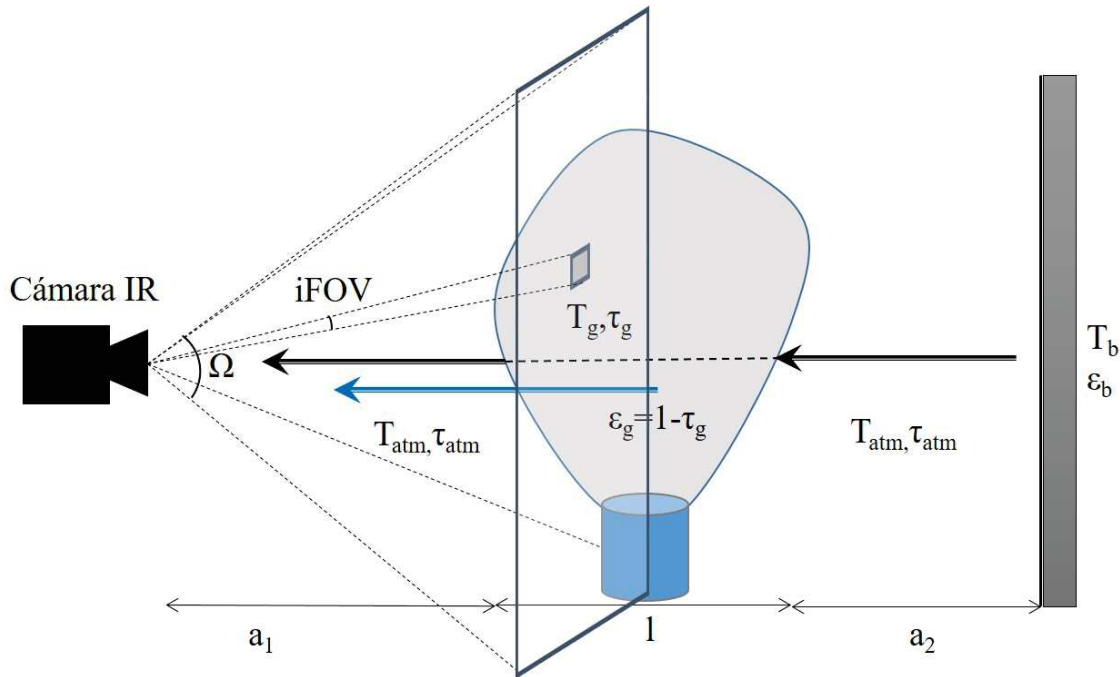


Figura 2.11: Modelo radiométrico característico en problemas de teledetección de gases con sistemas de imagen infrarroja.

El modelo radiométrico que consideraremos contempla las suposiciones que se enumeran a continuación:

1. Para cada píxel, la nube de gases será modelada a partir de una única temperatura y un sólo valor de concentración para cada uno de los gases que se encuentren presentes. Lo que equivale a decir que se asumirá que la pluma es homogénea a lo largo del campo de visión (iFOV) de cada píxel (x, y) , y los parámetros recuperados se considerarán valores efectivos a lo largo del volumen que sustenta el ángulo de visión. Gracias a esta aproximación podremos ignorar los fenómenos de emisión y absorción internos, como se muestra en el apartado 2.3.2, y la nube de gases podrá ser caracterizada por un único valor transmitancia τ_g ponderada (y, por ende, de emisividad, $\varepsilon_g = 1 - \tau_g$) que integra la contribución de todo el camino integrado en cada píxel.
2. La radiancia emitida por la atmósfera será despreciada frente a las contribuciones debidas a la propia emisión de la nube de gases, y la radiación proveniente del

fondo.

3. La emisividad del fondo ε_b es lo suficientemente elevada como para considerar que la reflexión de la radiación ambiente en el fondo es igualmente despreciable, sin llegar a considerar que necesariamente se trate de un cuerpo negro perfecto.
4. El volumen de gases se encuentra en condiciones de equilibrio termodinámico local (de forma que sea válida la distribución de Boltzmann) y el efecto de la absorción y el *scattering* debido a la materia particulada también puedan considerarse despreciables. Esta última consideración se emplea de forma habitual en las emisiones producidas por chimeneas industriales (ver [35]), y está incluso mucho más justificada en caso de aplicarse en situaciones como las que nos ocupan en esta tesis, más limpias (con menos partículas).

Bajo estas aproximaciones, la radiación incidente en el instrumento sensor para un píxel en presencia de gas, \mathcal{L}_g , estaría dada por la suma de dos términos: la radiación proveniente del fondo que atraviesa la nube de gases y la radiación emitida por el propio gas. Ambos se recogen en la ecuación 2.33, donde \mathcal{L}_{CN} es la radiancia de cuerpo negro gobernada por la ley de Planck, y T_b y T_g son las temperaturas a las que se encuentran el *background* y el gas, respectivamente, mientras que la emisividad del gas que consideraremos viene dada por el complementario de su transmitancia, $\varepsilon_g = 1 - \tau_g$:

$$\mathcal{L}_g = \mathcal{L}_{CN}(T_b)\varepsilon_b\tau_{a_1}\tau_g\tau_{a_2} + \mathcal{L}_{CN}(T_g)\cdot(1 - \tau_g)\tau_{a_1} \quad (2.33)$$

en la que se ha omitido la dependencia espectral, y donde τ_g , τ_{a_1} y τ_{a_2} son, respectivamente, las transmitancias asociadas a la pluma de gases y a la primera y segunda capa atmosférica (delimitadas por las distancias a_1 y a_2 en la figura 2.11).

Por otra parte, en un píxel sin presencia de gas la radiancia en el detector sería:

$$\mathcal{L}_{ref} = \mathcal{L}_{CN}(T_b)\varepsilon_b\tau_{a_1}\tau_{a_2} \quad (2.34)$$

donde se ha considerado que la nube de gases es ópticamente fina, de forma que la transmitancia atmosférica correspondiente a su espesor es aproximadamente uno. Como en la sección 2.3, asumiremos que es posible aplicar la expresión integral de la ley de Lambert-Beer, dado que el medio se considera homogéneo (suposición 1). Para una sola especie química absorbente, y un camino óptico de espesor l resultaba en que la transmitancia $\tau(\nu, c_g, T_g)$ venía dada por:

$$\tau(\nu, c_g, T_g) = e^{-\kappa(\nu, T_g) \cdot l} = e^{-a(\nu, T_g) \cdot c_g \cdot l} \quad (2.35)$$

donde el coeficiente de absorción del gas κ ha sido reescrito en términos de su absorptividad a y su concentración c_g , y la dependencia con la temperatura se muestra de forma explícita. La absorptividad espectral es un parámetro comúnmente bien conocido y que puede ser extraído de bases de datos espectroscópicas como haremos más adelante. Y, si más de una especie química se encuentra presente, la transmitancia total no es más que el producto de los distintos términos de transmitancia, uno por cada especie (ecuación 2.17).

En nuestro caso, deseamos obtener los valores de concentración de la nube de gases c_g , además de su temperatura T_g , a partir de medidas experimentales de $\mathcal{L}_g(\nu)$ y $\mathcal{L}_{ref}(\nu)$. Es necesario remarcar que la concentración sólo aparece en forma de producto $c_g \cdot l$ en las ecuaciones, por lo que nuestro resultado será la magnitud denominada como *densidad de columna* $Q_g \equiv c_g \cdot l$ en lugar de directamente c_g . Esto equivale a medir la cantidad de gas presente, como es habitual en otros métodos espectroscópicos de teledetección de gases, en unidades que serán habitualmente de $ppm \cdot m$ (partes por millón por metro) o $\% \cdot m$. Hecha esta aclaración, el objetivo final de nuestro método de medida será llegar a obtener una imagen de densidad de columna y una imagen de temperatura con valores de, respectivamente, $Q_g \equiv c_g \cdot l$ y T_g , en cada punto del campo de visión.

Según la ecuación 2.35, ambos parámetros podrían obtenerse, en principio, de la transmitancia, pero se plantean aquí dos dificultades.

En primer lugar, no medimos la transmitancia τ_g directamente, sino la radiancia L_g dada por la expresión 2.33, donde también hay otros parámetros desconocidos; de manera destacada, la propia temperatura del gas T_g . Hay que resolver el problema de despejar τ_g de nuestras medidas.

En segundo lugar, aún conociendo τ_g no resulta obvia la mejor estrategia para recuperar los valores de T_g y Q_g puesto que ambos parámetros están acoplados en la expresión de τ (ecuación 2.35) y, en particular, la absortividad depende de T_g de manera no trivial. Nos encontraremos aquí en toda su magnitud la dificultad de separar los efectos de ε y T que apuntamos en el apartado 2.4.4 sobre termografía IR. Abordaremos de manera sucesiva ambos problemas.

Sistemas de banda ancha

Finalmente, es necesario señalar que, implícitamente, nuestra descripción sólo considera el modelo radiométrico particularizado para una única longitud de onda, asumiendo que ésta sería recogida por un hipotético instrumento de medida, pero sin llegar a incorporar los efectos que dicho equipo pudiera introducir.

Sin embargo, el funcionamiento de algunos de los sistemas más empleados (como las cámaras IR convencionales) se basa en integrar la señal detectada a lo largo de una cierta región espectral, en general de ancho considerable. Esto conlleva que la medida se corresponda con un valor eficaz (y ponderado por la responsividad espectral $R(\nu)$) de la radiación incidente:

$$\mathcal{L}_{int} = \int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}(\nu) \cdot R(\nu) d\nu \quad (2.36)$$

En este proceso se combinan las contribuciones individuales provenientes de cada longitud de onda, lo cual no sólo mantiene el problema de acoplamiento entre variables al que aludíamos, sino que incluso lo acentúa dificultando las tareas de recuperación de datos.

2.5.2. Método de emisión-transmisión

En entornos en los que puede garantizarse la estabilidad y reproducibilidad de la nube de gases que se intenta estudiar (típicamente en medidas de laboratorio), estimar la transmitancia del gas de forma empírica es posible. Esto puede llevarse a cabo empleando distintas temperaturas de *background* en ausencia y presencia de los gases objeto. En este

principio se basa el conocido como *método de emisión-transmisión* (E-T) [20], que emplea un total de 4 medidas, realizadas para dos temperaturas de fondo (“fría”, T_c , y “caliente”, T_h), con y sin gas, (“on” y “off” respectivamente), obteniéndose las siguientes radiancias:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{on,T_c} &= \mathcal{L}_{CN}(T_c)\varepsilon_b\tau_{a_1}\tau_g\tau_{a_2} + \mathcal{L}_{CN}(T_g)(1 - \tau_g)\tau_{a_2} \\ \mathcal{L}_{on,T_h} &= \mathcal{L}_{CN}(T_h)\varepsilon_b\tau_{a_1}\tau_g\tau_{a_2} + \mathcal{L}_{CN}(T_g)(1 - \tau_g)\tau_{a_2} \\ \mathcal{L}_{off,T_c} &= \mathcal{L}_{CN}(T_c)\varepsilon_b\tau_{a_1}\tau_g^{atm}\tau_{a_2} \\ \mathcal{L}_{off,T_h} &= \mathcal{L}_{CN}(T_h)\varepsilon_b\tau_{a_1}\tau_g^{atm}\tau_{a_2}\end{aligned}\quad (2.37)$$

donde τ_g^{atm} representa la transmitancia de la región de la atmósfera que está ocupada por la nube de gases cuando ésta no se encuentra presente. Por simplicidad consideraremos que, al igual que en el apartado anterior, dicha nube de gases es ópticamente fina, de forma que la región atmosférica ocupada no produce efectos apreciables ($\tau_g^{atm} \approx 1$). Combinando las radiancias detectadas en los cuatro casos, es posible obtener una estimación empírica de la transmitancia de la nube de gas:

$$\frac{\mathcal{L}_{on,T_h} - \mathcal{L}_{on,T_c}}{\mathcal{L}_{off,T_h} - \mathcal{L}_{off,T_c}} = \frac{\tau_g}{\tau_g^{atm}} \approx \tau_g = 1 - \varepsilon_g \quad (2.38)$$

Bajo condiciones ideales, todos los términos relativos tanto a la atmósfera como al *background* quedan cancelados, por lo que es posible estimar la transmitancia espectral de la nube de gases (τ_g) sin requerir de una calibración radiométrica del instrumento (espectrorradiómetro) encargado de la medida. Esto resuelve nuestro primer problema, el de obtener τ_g .

Sin embargo, llevar a la práctica el método E-T requiere de entornos de laboratorio muy controlados. La falta de reproducibilidad de las temperaturas del fondo da lugar a errores importantes, y a las dificultades añadidas de contar con distintas medidas de fondo cambiante, habría que unir las inherentes a la falta de estabilidad en la nube de gases. También hay que señalar que para nubes de gases calientes, es necesario que T_c y T_h estén muy separadas para minimizar los errores, algo que es difícil de conseguir en la práctica. Estas dificultades hacen que tengan que entrar en juego las distintas aproximaciones que emplearemos a lo largo de este trabajo.

2.5.3. Aproximaciones: casos de emisión y absorción

La expresión 2.33 es la suma de dos términos, que habitualmente se denominan *emisión* y *absorción*. Es también común en la práctica que sólo uno de ellos sea el predominante, de forma que podemos diferenciar dos principios de medida en función de qué término aporte la mayor cantidad de energía. Distinguiremos por ello dos situaciones:

- **Modo de absorción o activo.** Nos encontraremos en este modo cuando la radiancia proveniente del fondo supere ampliamente a la emitida por la nube de gases. Será lo habitual cuando intentamos iluminar un gas no muy caliente de forma activa (mediante cuerpos negros, láseres,...) o bien éste se encuentre mucho más frío que

el ambiente. La expresión de la radiancia detectada en presencia de gas se reduce entonces a:

$$\mathcal{L}_g^{abs} = \mathcal{L}_{CN}(T_b) \varepsilon_b \tau_{a1} \tau_g \tau_{a2} \quad (2.39)$$

Al igual que en el método E-T, la condición de que la nube de gases sea ópticamente fina ($\tau_g^{atm} \approx 1$) provoca que la transmitancia asociada a ésta pueda estimarse con la ayuda de radiancias de referencia, pero ahora basta una sola con el fondo a igual temperatura. Con la expresión dada en 2.34 para \mathcal{L}_{ref} obtenemos:

$$\tau_g(\nu) \approx \frac{\mathcal{L}_g^{abs}(\nu)}{\mathcal{L}_{ref}(\nu)} \quad (2.40)$$

(donde hemos indicado explícitamente la dependencia espectral).

Vemos pues que cuando la emisión del gas es despreciable en comparación con la del fondo, la transmitancia se obtiene como una ratio entre las radiancias detectadas en un píxel de medida y otro de referencia, y de nuevo no es necesaria una calibración radiométrica del equipo.

- **Modo de emisión o pasivo.** En contrapartida al caso anterior, ahora supondremos que el término asociado a la emisión térmica espontánea de la nube de gases prevalece sobre la radiación del fondo. Esto es lo que ocurre para temperaturas del gas mucho mayores que las del fondo ($T_g \gg T_b$), como habitualmente pasa en el caso de llamas y combustiones así como en muchos procesos industriales. De forma equivalente, la expresión 2.33 se simplifica en 2.41.

$$\mathcal{L}_g^{emis} = \mathcal{L}_{CN}(T_g)(1 - \tau_g)\tau_{a2} \quad (2.41)$$

Sin embargo, en este caso la ratio entre radiancias correspondientes a la presencia y ausencia de gas no conduce a una fórmula explícita para la transmitancia experimental. Despejando τ_g obtenemos:

$$\tau_g(\nu) \approx 1 - \frac{\mathcal{L}_g^{emis}(\nu)}{\mathcal{L}_{CN}(T_g, \nu) \cdot \tau_{a2}(\nu)} \quad (2.42)$$

Como desconocemos T_g nos encontramos que aquí la transmitancia no puede ser medida de forma directa sino que sólo tendremos acceso a la radiancia. Como veremos más adelante, será finalmente posible determinar Q y T, pero se planteará una primera dificultad de entrada, ya que será necesario que el sistema de imagen espectral esté convenientemente calibrado.

2.5.4. El problema de la recuperación de Q y T

Pasamos ahora a la segunda dificultad que mencionábamos: obtener Q_g y T_g supuesta conocida la transmitancia. Una posibilidad es introducir el valor de τ_g en la expresión para \mathcal{L}_{on, T_c} del método E-T (ecuación 2.37). Eligiendo una T_c suficientemente fría para que el término de absorción sea despreciable, podemos despejar:

$$\mathcal{L}_{CN}(T_g) = \frac{\mathcal{L}_{on, T_c}}{(1 - \tau_g) \cdot \tau_{a2}} \quad (2.43)$$

Asumiendo τ_{a2} conocida (o $\tau_{a2} \approx 1$ en una ventana atmosférica) obtenemos T_g invirtiendo la ley de Planck. Conocida T_g , su valor puede introducirse ahora en la expresión de la transmitancia dada por la ley de Lambert-Beer, para así obtener Q , resolviendo el problema de acoplamiento entre ambas variables.

Este planteamiento, aunque viable en condiciones ideales de laboratorio, no proporciona resultados válidos en la mayor parte de casos de interés práctico, tanto por las dificultades inherentes al propio método E-T como por la alta incertidumbre que podría asociarse a la inversión de T_g . Casos de uso relevantes donde el método E-T no puede ser empleado son la caracterización de emisiones gaseosas a grandes distancias o desde plataformas aéreas; mientras que otras aplicaciones de interés industrial, como la caracterización de procesos de combustión, aunque puedan ser estudiadas en entornos controlados, su alto nivel energético y baja estabilidad temporal conllevan serios apuros para la aplicación de esta técnica (la radiación emitida resulta ser invariablemente preponderante frente al resto de términos, lo que compromete la propia estimación de τ_g).

Precisamente en aquellas situaciones en las que el método E-T ha de ser descartado es donde se concentrará el contenido de nuestro trabajo, motivo por el cual uno de los núcleos del mismo es el estudio de algoritmos de recuperación para la cuantificación de Q y T . La propuesta sugerida en esta tesis se basa en sacar partido de una fuente de información adicional que hasta ahora hemos pasado por alto: el **dominio espectral**, que a través de una adecuada **resolución** espectral compense las limitaciones prácticas de las medidas experimentales que hemos expuesto, y resuelva la ambigüedad en la determinación del par Q_g, T_g . Ello motiva el uso de los denominados como *sistemas de imagen hiperespectral*, que presentaremos en el capítulo 4.

Este es el enfoque adoptado por los algoritmos de cuantificación de la literatura reciente. Estos suelen clasificarse atendiendo a las aproximaciones llevadas a cabo en el modelado radiométrico, fundamentalmente en relación con la transmitancia (a través de la expresión de Lambert-Beer, que puede linealizarse para plumas ópticamente finas), y en lo que se refiere al contraste térmico entre la nube de gases y el fondo. En [73] es posible encontrar una revisión del todo conveniente, con las familias de soluciones más destacadas junto a sus particularidades, desde el uso de estimadores bayesianos [43], hasta aproximaciones basadas en el equilibrio térmico [32], o alternativas como el algoritmo SB (*Selected Band*) [85], entre muchas otras.

Como veremos en el capítulo 5, nuestra propuesta sigue la línea marcada por [127], dentro de lo que se denominan técnicas no lineales basadas en el ajuste por mínimos cuadrados (*nonlinear least-squares*, NLS), que se caracterizan por una gran capacidad de generalización y adecuación a diferentes escenarios. Dicha estrategia consiste en utilizar el modelo radiométrico para generar espectros, bien de transmitancia (en el modo de absorción) o de radiancia (en el modo de emisión). Estos espectros dependen de T_g y Q_g , parámetros que se hacen variar con un algoritmo de optimización hasta encontrar los valores que proporcionan el mejor acuerdo con los espectros experimentales. Se aprovecha así la gran redundancia de los espectros, en los que miles de datos son función sólo de dos variables, T y Q , para resolver el problema de acoplamiento. En el capítulo 6 abordaremos otros métodos que buscan reducir la complejidad y usaremos técnicas de regresión no lineal para recuperar los datos de un modo más eficiente.

Por último, y pese a que a continuación la mayor parte de nuestros planteamientos se

apoyen en dispositivos que dispongan de capacidad de selección espectral, los detectores de banda ancha tradicionales aún siguen teniendo acogida en otros ámbitos, y resultan idóneos en aplicaciones de, a priori, menor complejidad. Por este motivo, durante el siguiente capítulo, y a modo de preámbulo, trataremos un caso de utilización característico de estos sensores, lo que nos permite seguir profundizando en el problema de la telede-
tección de gases antes de abordar el uso de sistemas de imagen hiperespectral.

Teledetección activa de gases

A lo largo del capítulo anterior hemos tratado de introducir los fundamentos físicos del problema de la teledetección de gases en infrarrojo, describiendo la tecnología capaz de implementar y dar soporte a dichos principios y finalizando con el planteamiento del problema de la cuantificación. La resolución de este problema (uno de los objetivos principales de esta tesis) necesitará hacer uso de sistemas con resolución espectral, lo que implica una complejidad elevada tanto en la instrumentación como en la algorítmica de procesado. Por este motivo en este capítulo comenzaremos tratando un problema más sencillo: el de la detección de gases mediante sensores de imagen infrarroja de banda integrada o monobanda, como los descritos en el apartado 2.5.1, sin pretender su cuantificación. Este tipo de dispositivos pueden sintonizarse para que su banda de operación coincida con la firma espectral de un determinado gas o familia de gases, mejorando notablemente su sensibilidad y capacidad de identificación. Sin embargo, las líneas individuales de cada gas no serán observadas y, en lugar de eso dispondremos de una señal proporcional al valor integrado a lo largo de un determinado ancho de banda.

A la vez que la complejidad de estos dispositivos se ve reducida de forma notable, en términos de coste, peso, tiempo de vida, etc., las posibilidades de ser empleados en un abanico más amplio de aplicaciones crecen de forma considerable gracias a su facilidad de integración. Lo esencial aquí no es tanto la algorítmica del procesado, mucho más limitada ahora, sino el adecuado diseño del principio de detección y los elementos del sistema sensor (selección espectral, sistema óptico, derivas térmicas, etc).

En este capítulo se parte del estado actual de los sistemas para la detección de hidrocarburos, proponiendo un diseño alternativo y estimando las prestaciones y mejoras que supondría su implantación en un posible sistema automático. En concreto, se propone el uso de fuentes de radiación infrarroja para reducir, por un lado los límites de detección y, por otro, el impacto del escenario de medida (a través del contraste térmico) en este proceso. Se trata de un principio de operación basado en lo que se denominan como técnicas de *teledetección activa*.

El análisis realizado también sirve de introducción a la modelización y simulación de escenarios radiométricos, que será de gran utilidad en capítulos posteriores.

Finalmente, se presenta una propuesta de diseño adaptada a los requisitos de una aplicación de interés práctico: el análisis de estanqueidad de depósitos de combustible, y se alcanza a construir un prototipo validador de la metodología de detección propuesta y de los límites de detección estimados de forma teórica mediante modelos radiométricos. Se concluye el capítulo mostrando las pruebas llevadas a cabo sobre sistemas a escala y

los resultados de su aplicación en un caso real de mantenimiento de una aeronave.

3.1. Detección de gases en entornos industriales

Dentro de las líneas de aplicación mencionadas, recientemente se ha convertido en algo habitual encontrar los sistemas de detección de gases embarcados en plataformas robóticas de diversa índole. Un caso de especial relevancia son los sistemas UAV (*Unmanned Aerial Vehicles*), donde existe una creciente tendencia a la incorporación de cargas de pago basadas en tecnologías de teledetección de gases. Estos sistemas se vienen consolidando como una alternativa cada vez más empleada para la realización de tareas de inspección, en muchos casos rutinarias, y que, en ocasiones, pueden significar elevados riesgos derivados del difícil acceso y peligrosidad que entrañan ciertas instalaciones de la industria química y energética [70]. Algunas de las aplicaciones más demandadas por estos sectores son las siguientes:

- *Inspección de gaseoductos.* Esta es una de las aplicaciones más populares, sirviendo de soporte al mantenimiento que la legislación establece para las líneas de transporte y suministro de gas natural, cuyo componente mayoritario es el metano (en un 80 % aproximadamente); y que suponen extensiones del orden de miles de kilómetros. Las centrales de regasificación, receptoras del gas natural licuado también requieren de este tipo de sistemas de detección.
- *Mantenimiento de transformadores eléctricos,* donde se emplean con gran asiduidad gases refrigerantes y aislantes de elevadas constantes dieléctricas. Uno de los más representativos es el hexafluoruro de azufre (SF_6), que también se caracteriza por ser uno de los compuestos cuyos efectos de tipo invernadero son más notables.
- *Detección de fugas en procesos industriales.* Un gran porcentaje de los compuestos habitualmente empleados por la industria química y metalúrgica pueden considerarse como potencialmente tóxicos; por ello, dichas plantas industriales son sometidas a continuos controles y a la monitorización de emisiones.
- *Detección de fugas en centrales solares y centros de tratamiento de residuos.* Dentro del ámbito de las energías renovables, las centrales de tipo termosolar basadas en cilindro parabólico emplean hidrocarburos (aceites, en general) para la conducción del calor generado; lo cual se traduce en una creciente demanda de estrategias de mantenimiento eficientes.

El principal objetivo de este capítulo es el diseño de un sistema de imagen para la teledetección de gases tóxicos o peligrosos, que pueda ser empleado en entornos industriales como los aquí descritos. En concreto, propondremos una metodología de detección basada en principios activos que puede ser particularmente provechosa en entornos locales; esto es, cuando la fuga se encuentra a una distancia pequeña del sistema detector.

El reto aquí consiste en desarrollar un sensor que permita la visualización de gases en tiempo real, y que aporte información adicional sobre la cantidad de gas presente, al menos de forma semi-cuantitativa en términos de la concentración. Todo ello sujeto a

las restricciones de tamaño, consumo, mantenimiento y tiempo de vida que supone la integración en sistemas portátiles.

3.1.1. Sistemas in-situ

Los sistemas clásicos de teledetección, denominados in-situ, requieren de contacto directo entre el gas y el sensor para proporcionar medidas. A la hora de abordar la inspección de un determinado área, los sistemas in-situ han de ser desplazados a lo largo de toda la región que se precisa examinar, lo cual supone una desventaja evidente. Sin embargo, este tipo de sensores son los más empleados en entornos industriales debido a su bajo coste y a su facilidad de integración con sistemas microcontroladores.

La tecnología más usada es la conocida como sensores MOX (*Metal OXide*) [128], dado que proporcionan una gran sensibilidad frente a los compuestos de mayor interés, tiempos de respuesta cortos y una buena estabilidad si se compara con otras alternativas disponibles. Además, los sensores MOX son de muy fácil acceso y disponibilidad, con costes de fabricación bajos, aunque en ocasiones pueden requerir de calibraciones adicionales que incrementan su coste final. En el otro lado de la balanza, una de las mayores limitaciones de esta tecnología radica en su escasa selectividad, ya que pese a que su sensibilidad frente a la presencia de un gas específico puede llegar a ser muy elevada, su respuesta también se extiende a otros compuestos, dificultando una correcta identificación. Para solventar este inconveniente, es habitual encontrar dispuestos diferentes sensores MOX, con distinta sensibilidad, en un formato de array. Las respuestas de todos ellos, aunque inicialmente solapadas en cuanto a la sensibilidad al mismo tipo de compuestos, pueden analizarse mediante técnicas basadas en el reconocimiento de patrones permitiendo una correcta identificación y cuantificación. Estas técnicas fueron introducidas en la década de los 80 y son conocidas popularmente como *electronic noses* o *e-noses* [140].

Los sensores *in-situ* por sí solos difícilmente pueden proporcionar información acerca de la ubicación exacta de la fuente de gas que miden, por lo que ésta debe obtenerse por otras vías. Así, pese a su uso extendido, esta tecnología de forma aislada no es capaz de solventar los requerimientos de la mayor parte de aplicaciones, aunque se han llegado a proponer algoritmos para la construcción de mapas de concentración usando sensores embarcados en robots móviles [69], registrando las trayectorias seguidas por estos.

3.1.2. Sistemas de teledetección

En lo que respecta a sistemas de teledetección de gases específicamente diseñados para ser empleados en sistemas portátiles, existe un buen número de dispositivos basados en tecnología TDLAS (*Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy*), cuyo principio de operación se basa en la absorción de energía en la región infrarroja. A diferencia de los sistemas de imagen que describiremos a continuación, estos dispositivos emplean una única línea de absorción del gas de interés, junto a una banda espectral de referencia que no es sensible a la presencia de dicho gas. De esta forma es posible cuantificar la pérdida de intensidad provocada por el gas, directamente relacionada con el producto concentración por camino óptico o densidad de columna (ver capítulo 2). Al contrario de lo que sucede en sensores tipo MOX, este principio de operación resulta enormemente selectivo, dado que las líneas de absorción son extremadamente representativas de cada compuesto. El

desplazamiento entre ambas longitudes de onda de operación se consigue mediante láseres sintonizables, cuyos tiempos de respuesta son sumamente reducidos y permiten la incorporación de estrategias de detección basadas en la modulación tanto de la longitud de onda portadora como de la potencia empleada [28], incrementando su sensibilidad.

Dentro de la tecnología TDLAS, existen dispositivos específicos como el denominado RMLD (*Remote Methane Leak Detector*) [29], destinado fundamentalmente a la detección de emisiones fugitivas de gas natural. Este sistema incorpora una fuente de luz láser en el infrarrojo próximo o NIR, próxima al elemento detector, y cuya radiación se refleja en el fondo atravesando posteriormente la nube de gases a detectar. Dicho mecanismo puede extenderse para conformar mapas de concentración si se introduce un sistema de barrido adicional, convirtiéndose en una alternativa más precisa y eficiente que los sistemas *in-situ*.

3.1.3. Teledetección de gases mediante imagen IR

A día de hoy es posible encontrar diferentes sistemas de visualización de gases basados en imagen infrarroja, siendo unos de los más populares los correspondientes a la familia GasFindIR [26] de la compañía FLIR o los desarrollados por la empresa de origen israelí Opgal [87], por citar algunos ejemplos. Además, recientemente se han consolidado cada vez más propuestas que apuestan por el uso de esta tecnología en sistemas UAV o similares, para abordar tareas de inspección como las descritas. Sin embargo, estas aproximaciones todavía no pueden considerarse como alternativas maduras tratándose de un campo aún en desarrollo en el que tienen cabida aportaciones de diversa índole [6].

Una de las apuestas mas ambiciosas a la hora de incorporar tecnología de detección de gases en dispositivos móviles ha sido desarrollada por la Universidad de Kassel, en Alemania, donde en el año 2012 se inició el desarrollo del proyecto *RoboGasInspector* [117]; cuyo principal objetivo era la automatización de tareas de inspección rutinarias como las que tienen lugar en plantas industriales de gran extensión. Ello culminó con la construcción de un prototipo basado en una plataforma robótica móvil, que embarcaba diferentes tecnologías de detección de gases: una cámara térmica en el infrarrojo térmico ($8 - 12\mu m$), modelo FLIR 320; un sistema RMLD para la detección de hidrocarburos provisto de un sistema de barrido (*scanning*); y, por último, una cámara FLIR GasFindIR para detección de fugas. Sin embargo, y pese al gran avance que supone el desarrollo de este tipo de alternativas, los autores constatan la necesidad de mejorar los sistemas de visualización empleados y proponen dichas acciones como trabajos futuros.

3.2. Modelos radiométricos

Pese a que desde un punto de vista radiométrico la detección pasiva de gases es uno de los casos con menor complejidad, es sin embargo muy útil en la práctica analizarla con cierto detenimiento.

3.2.1. Caso de detección pasiva

Comenzaremos estudiando el caso sencillo en el que el gas no está sometido a iluminación externa. Nos valdremos para ello del diagrama mostrado en la figura 3.1, en la que por simplicidad supondremos que el fondo puede considerarse un cuerpo negro y, que la fuga de gases presenta emisión en una banda espectral sin atenuación atmosférica que puede caracterizarse a través de su transmitancia τ . En este caso la radiancia \mathcal{L}_g [$W/m^2 sr$] que captaría un sistema de imagen IR que percibiera la fuga frente al fondo vendría dada por la ecuación 2.33, haciendo $\tau_{a1} = \tau_{a2} = \tau_a = 1$ y $\varepsilon_b = 1$:

$$\mathcal{L}_g = \mathcal{L}_{CN}(T_b) \cdot \tau + \mathcal{L}_{CN}(T_g) \cdot (1 - \tau) \quad (3.1)$$

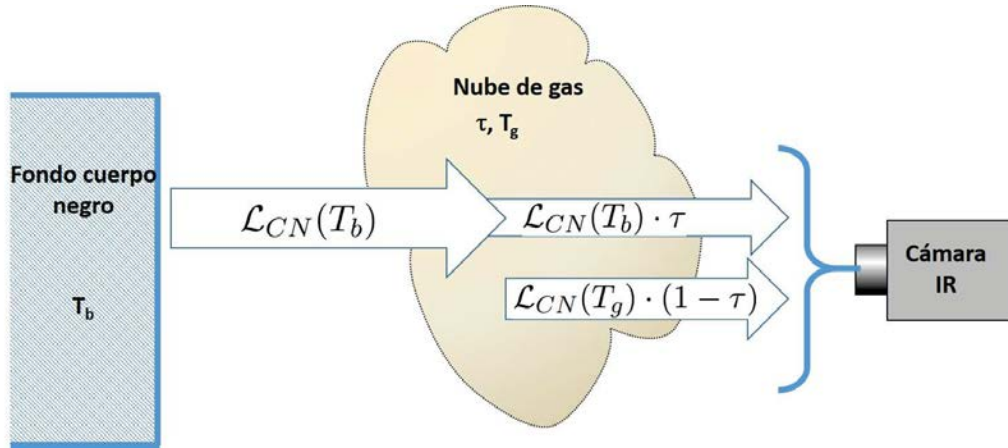


Figura 3.1: Esquema de detección de gases pasivo, considerando un fondo con las propiedades de cuerpo negro y sin fuentes de iluminación externas.

Por otro lado, la radiancia en aquellas zonas sin presencia de gas viene dada por $\mathcal{L}_{ref} = \mathcal{L}_{CN}(T_b)$, y el contraste radiométrico entre ambas regiones, con y sin gas, sería:

$$\mathcal{L}_{ref} - \mathcal{L}_g = [\mathcal{L}_{CN}(T_b) - \mathcal{L}_{CN}(T_g)] \cdot (1 - \tau) \quad (3.2)$$

Es fácil inferir que conforme el contraste térmico entre el gas y el fondo se reduce ($T_g \rightarrow T_b$) el contraste radiométrico tendería a cero; siendo de esta forma la fuga indistinguible del fondo, y pudiéndose concluir que la alternativa pasiva (y monobanda) sólo ofrece garantías de funcionamiento en condiciones de suficiente contraste térmico.

En la práctica, este caso resulta en cierta medida habitual dado que las fugas de gases provocan un proceso de expansión adiabática que se traduce en un descenso de la temperatura. Sin embargo, dado que la radiación emitida por el gas está ponderada por su emisividad, cuyo valor $1 - \tau$ puede ser muy bajo en caso de fugas pequeñas, la detección del gas puede verse comprometida si la diferencia térmica con el fondo no es elevada. Cabe añadir que este método puede incurrir con facilidad en falsas alarmas, dado que cualquier variación en la temperatura del fondo puede ser malinterpretada como la presencia de gas. De hecho, en entornos industriales es difícil contar con fondos uniformes exentos de esta problemática, y es habitual recurrir al uso de procesamiento temporal que tome partido de la turbulencia del flujo de gas, detectando su movimiento. Pero, aunque

el procesado temporal es una posibilidad que siempre puede ser incorporada en etapas posteriores, no parece aconsejable que el principal criterio de detección e identificación de fugas se base en su comportamiento espacio-temporal, lo cual excluiría casos como el de fugas que se asemejen a un flujo laminar estacionario.

A partir de la ecuación 3.2, conociendo la absorptividad espectral, la calibración de la cámara y su NETD (*Noise Equivalent Temperature Difference*) es posible encontrar la concentración mínima detectable (CMD en adelante), si bien no es posible hacerlo de un modo directo ya que la señal integrada por un sistema de imagen IR suele ser difícilmente invertible en términos de la densidad de columna. Recurriendo a métodos iterativos de optimización (que varían la concentración hasta encontrar el valor en que el contraste radiométrico dado por 3.2 es el mínimo detectable por la cámara), es posible realizar estimaciones como la de la figura 3.2, donde se representa la cantidad de gas mínima detectable en función de la temperatura de dicho gas para un esquema de detección pasivo. Resulta significativo comprobar como la cantidad de gas necesaria aumenta de forma asintótica cuando nos encontramos en las inmediaciones del punto de equilibrio térmico, reduciendo drásticamente la probabilidad de detección.

Para obtener la figura 3.2, el espectro de transmitancia ha sido calculado mediante la expresión de la ley de Lambert-Beer descrita en el anterior capítulo, a partir de los datos proporcionados por la base de datos HITRAN. En cuanto a la selección espectral, asumiremos que ésta se lleva a cabo por medio de un filtro interferencial, con un ancho espectral de 375 nm , centrado en la banda de absorción del metano en torno a $\lambda_0 = 3,3\text{ }\mu\text{m}$. Las radiancias detectadas son el resultado de integrar la radiancia espectral para el ancho de banda indicado.

3.2.2. Caso de detección activa

Para continuar nuestro análisis, relajaremos algunas de nuestras hipótesis iniciales hasta modelar un escenario más realista. En primer lugar, ya no consideraremos el fondo como un cuerpo negro, sino que asumiremos que dispone de una cierta reflectancia de valor apreciable ρ_b (y por tanto una emisividad de $1 - \rho_b$), lo que modifica las expresiones anteriores, obteniéndose una radiancia detectada para un píxel con y sin gas equivalente a:

$$\mathcal{L}_g = [\mathcal{L}_{CN}(T_b) \cdot (1 - \rho_b) + \mathcal{L}_{CN}(T_a) \cdot \rho_b] \cdot \tau + \mathcal{L}_{CN}(T_g) \cdot (1 - \tau) \quad (3.3)$$

$$\mathcal{L}_{ref} = \mathcal{L}_{CN}(T_b) \cdot (1 - \rho_b) + \mathcal{L}_{CN}(T_a) \cdot \rho_b \quad (3.4)$$

Esto no conlleva ningún tipo de mejora en la detección, sino que la condición de contraste térmico ahora se consigue a una temperatura ligeramente diferente de la del fondo. Sin embargo, asumir de forma realista que el fondo se puede modelar como un cuerpo gris (en general con emisividad menor que 1), crea las condiciones para la introducción de un esquema de detección más eficiente basado en la inclusión de una fuente de iluminación externa, de forma que la radiación que proporcione ésta se vea reflejada en el fondo para atravesar en dos ocasiones (ida y vuelta) la masa de gases que se intentaría detectar.

El nuevo modelo radiométrico es más complejo y se esquematiza en la figura 3.3. Además de los términos de emisión del fondo y del gas, tenemos ahora un término de radian-

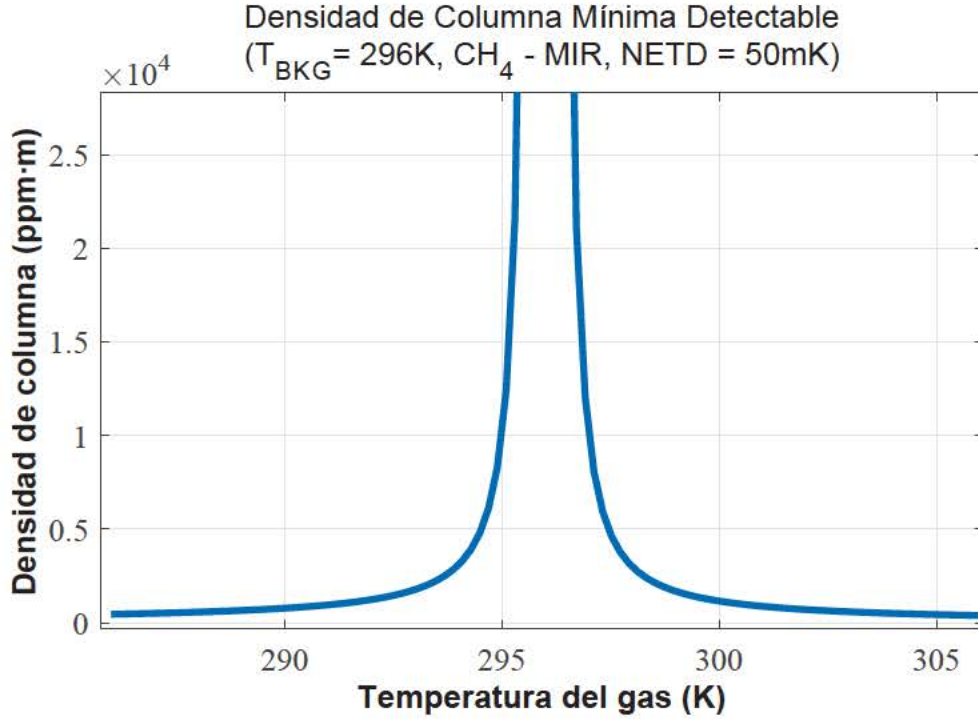


Figura 3.2: Estimación de la densidad de columna mínima detectable para la detección pasiva de metano en el infrarrojo medio, frente a un background de temperatura 296 K.

cia ambiente reflejada ($\mathcal{L}_{CN}(T_a) \cdot \rho_b \cdot \tau$) y considerando la radiancia de la fuente como \mathcal{L}_s , el modelo radiométrico se completaría con la inclusión del término $\mathcal{L}_s \cdot F \cdot \tau^2 \rho_b$, en el que F denota el factor geométrico resultado de considerar el ángulo sólido correspondiente al diagrama de radiación de la fuente y su posterior reflexión en el fondo (asumiéndose su carácter lambertiano). En este caso F puede aproximarse por la relación entre el área iluminado (A_b) y el correspondiente a la fuente de excitación (A_s), de forma que $F = A_s/A_b$. En general, esta iluminación externa proporciona un incremento de la sensibilidad a la concentración del gas, gracias al factor τ^2 , mientras que se mantiene prácticamente independiente de la temperatura del gas. Obtendremos que la radiancia detectada, respectivamente sin y con iluminación, \mathcal{L}_{off} y \mathcal{L}_{on} , para un píxel que corresponde a la fuga (\mathcal{L}_g) es:

$$\mathcal{L}_{off} = [\mathcal{L}_{CN}(T_b) \cdot (1 - \rho_b) + \mathcal{L}_{CN}(T_a) \cdot \rho_b] \cdot \tau + \mathcal{L}_{CN}(T_g) \cdot (1 - \tau) \quad (3.5)$$

$$\mathcal{L}_{on} = [\mathcal{L}_{CN}(T_b) \cdot (1 - \rho_b) + \mathcal{L}_{CN}(T_a) \cdot \rho_b] \cdot \tau + \mathcal{L}_{CN}(T_g) \cdot (1 - \tau) + \mathcal{L}_s \cdot F \cdot \tau^2 \cdot \rho_b \quad (3.6)$$

a partir de donde la radiancia de referencia \mathcal{L}_{ref} , en ausencia de gas, se obtiene sin más que imponer que $\tau = 1$ en ambos casos pasivo y activo.

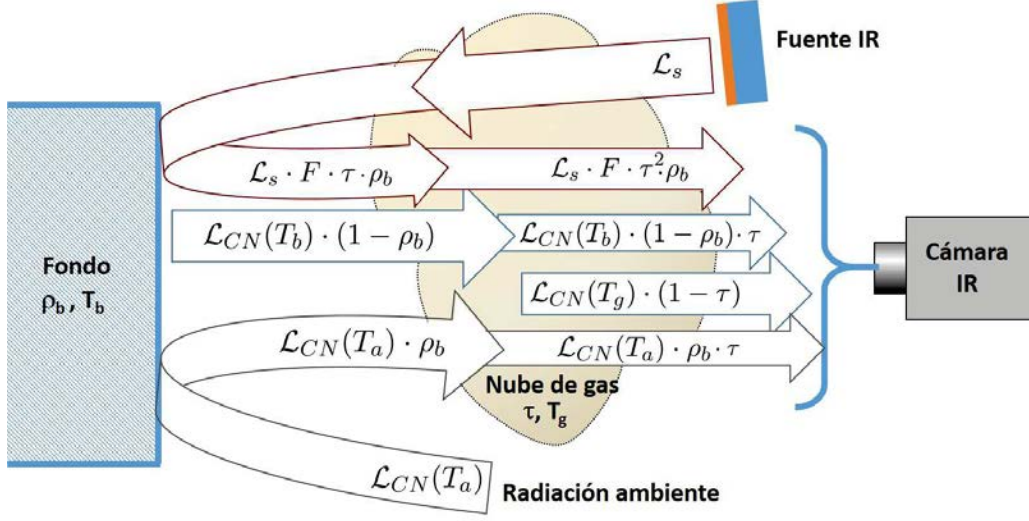


Figura 3.3: Esquema de detección de gases activo, considerándose en este caso la emisividad del fondo como un cuerpo gris e iluminación externa.

3.2.3. Concentración mínima detectable

Con el objetivo de servir de comparación entre ambas alternativas, activa y pasiva, hemos calculado las radiancias correspondientes a las ecuaciones 3.5 y 3.6 en el caso de una fuga característica de metano (CH_4). La elección de este compuesto en particular se debe a su importancia en el sector industrial y energético, aunque tanto los cálculos realizados como el procedimiento seguido podrían realizarse de forma completamente análoga para otro compuesto de interés. Hemos seleccionado un rango de concentraciones que varía entre $c = 0\%$ y $c = 100\%$, y una sección o camino óptico equivalente a $l = 10\text{ cm}$, junto a una temperatura del gas $T_g = 280\text{ K}$. En cuanto a la temperatura del fondo, supondremos que ésta puede variar entre $T_b = 250\text{ K}$ y $T_b = 310\text{ K}$, mientras que su emisividad permanece constante y de valor $\varepsilon_b = 0,8$, por lo que $\rho_b = 0,2$. Este último valor de emisividad es relativamente alto, de forma que los datos obtenidos por el modo pasivo no se vean excesivamente penalizados en nuestras simulaciones. Para finalizar, la temperatura ambiente seleccionada ha sido $T_a = 280\text{ K}$, aunque es de esperar que, en este caso, los resultados obtenidos no se vean prácticamente influenciados por este parámetro.

La fuente será modelada como un cuerpo gris de emisividad $\varepsilon = 0,75$, una temperatura de 1150°C y un área de $A_s = 0,2\text{ cm}^2$ que, por medio de un reflector parabólico focaliza su radiación en una región del fondo de dimensiones $A_b = 50 \times 50\text{ cm}^2$. Con esta consideración, el factor geométrico resulta en $F = A_s/A_b = 8 \cdot 10^{-5}$. Los valores empleados para la fuente se basan en las especificaciones facilitadas por el fabricante HawEye Technologies para el modelo de fuente infrarroja IR-18, con un consumo total eléctrico de 18 vatios [40], y que habría de situarse a una distancia aproximada de 2 metros para la relación de áreas especificada.

Como estrategia de detección, simplemente asumiremos que la señal viene dada por la variación de \mathcal{L}_{ref} o \mathcal{L}_g debida exclusivamente a la presencia de gas, lo que se traduce en calcular la diferencia entre los valores de \mathcal{L} para respectivamente la concentración propia

de la fuga de gas, \mathcal{L}_g , y la debida a una concentración nula, \mathcal{L}_{ref} (donde ambas se calculan con la fórmula 3.5 en el caso pasivo, y con la fórmula 3.6 en el caso activo).

El ruido del detector puede estimarse de forma precisa a partir de la información facilitada por el fabricante acerca del parámetro NETD, ya mencionado en el capítulo introductorio de este trabajo, y que recordamos expresa la potencia de ruido del equipo en términos de una cierta diferencia de temperatura con respecto al ambiente. Las tecnologías más recientes de cámaras infrarrojas en la banda del infrarrojo medio, esto es operando en la banda de 3 a 5 μm empleando detectores de tipo cuántico con refrigeración criogénica (como los ya mencionados basados en InSb o MCT), alcanzan valores de 15 mK @300K. Sin embargo, optaremos por un valor de NETD mucho más conservador, de 50 mK @300K, que es incluso razonable para arrays de microbolómetros sin refrigerar, mucho más baratos y con un consumo significativamente menor. Además, se ha considerado un valor de NETD lo suficientemente elevado como para dar cuenta de las posibles pérdidas de sensibilidad originadas por el uso de un número F relativamente alto. Y en caso de que las exigencias de la aplicación así lo precisasen, el valor de NETD habría de corregirse en consecuencia, para lo que es posible emplear la ecuación 2.26 propuesta por Holst. Si expresamos el ruido en unidades de radiancia integrada o NEIR (*Noise Equivalent Integrated Radiance*) resulta en $3,4 \cdot 10^{-3} W/m^2 sr$, donde se ha asumido que el filtro interferencial tiene un comportamiento ideal en cuanto a su transmitancia, no alterando dicho valor. Bajo estas consideraciones, la relación señal a ruido vendrá expresada en términos de la ecuación 3.7.

$$SNR = \frac{\Delta L_{int}}{NEIR} = \frac{|\mathcal{L}_{ref} - \mathcal{L}_g|}{NEIR} \quad (3.7)$$

En la figura 3.4 se muestra una gráfica comparativa de la señal obtenida frente a la concentración de CH_4 , considerando tres temperaturas de *background* diferentes, y sin incluir una fuente de iluminación externa (en todos los casos $l = 10 cm$, $T_g = 280K$, y $T_a = 280K$). Si atendemos al nivel de ruido que se representa en una línea horizontal marcada como NEIR, es claro que la relación señal a ruido (SNR) depende fuertemente de la temperatura del fondo, y, tal y como era de esperar, en la medida en que el contraste térmico entre la fuga de gas y el background se desvanece (como para $T_b = 280K$), la fuga se torna indetectable (ΔL permanece siempre por debajo de NEIR).

Los resultados de las simulaciones descritas pueden abreviarse en términos de la concentración mínima detectable (CMD), definida anteriormente como la concentración de gas que produce un contraste radiométrico equivalente al ruido del detector, o en otras palabras, una SNR unitaria. Estos valores vienen dados para los cortes de las curvas de ΔL con la línea de NEIR en la figura 3.4, para ambos casos activo y pasivo, y para diferentes temperaturas de fondo, y son mostrados en la tabla 3.1, donde se comprueba una mejora muy sustancial de la detectabilidad gracias al efecto de la iluminación externa.

En aras de la simplicidad, los valores de CMD han sido obtenidos bajo la asunción de incidencia normal por parte de la iluminación del fondo. En el caso de que entre la superficie de la fuente y el fondo existiera algún tipo de inclinación, las expresiones empleadas habrían de contemplar la influencia de un factor de tipo coseno en el factor geométrico F ; lo que resulta en los valores de CMD mostrados en la figura 3.5 para un caso típico de detección de gases ($T_b = T_g = T_a = 280K$) y un rango de inclinación de $\pm 60^\circ$. Una

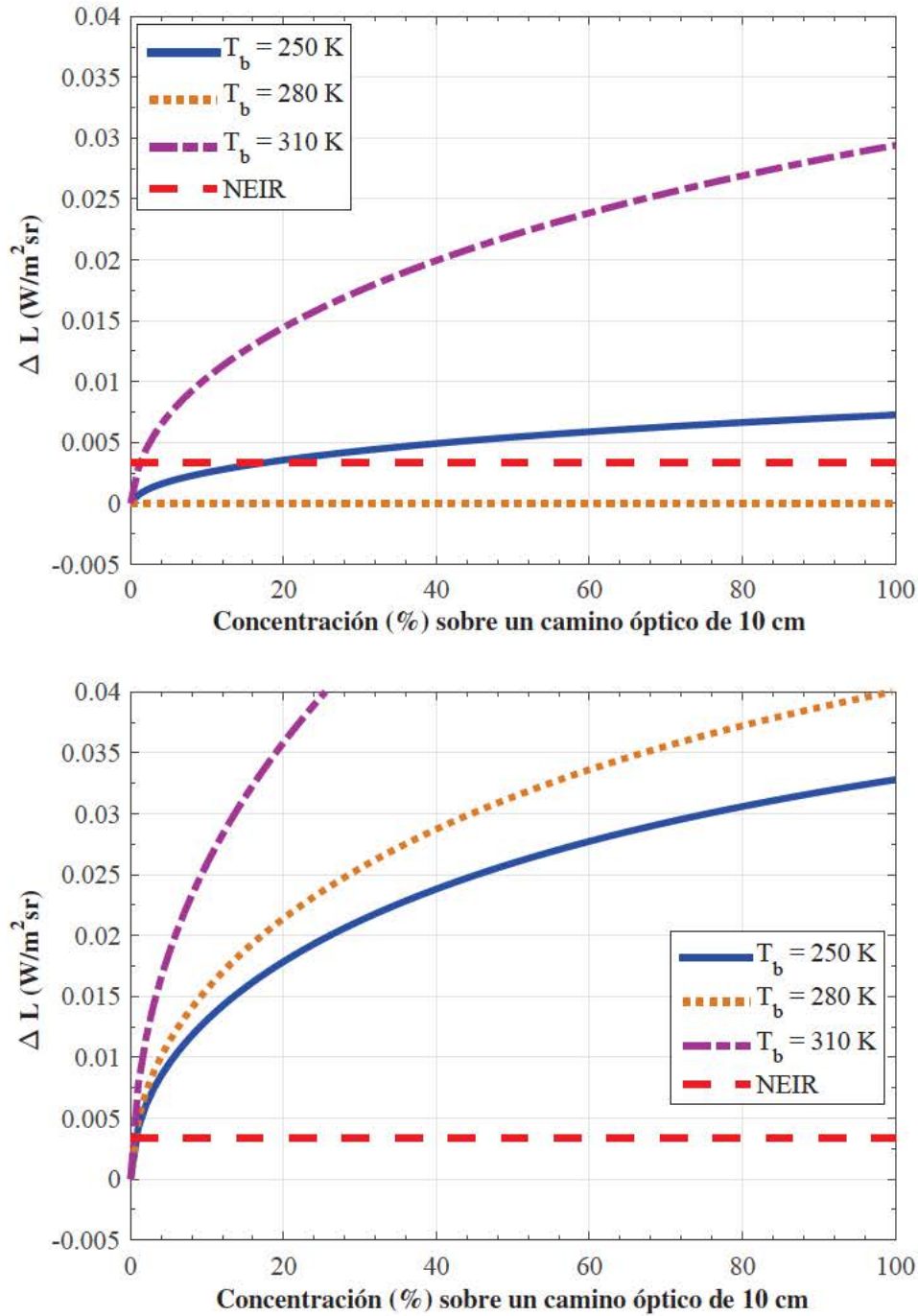


Figura 3.4: Representación del término de señal (definido como $\Delta \mathcal{L} \equiv |\mathcal{L}_g - \mathcal{L}_{ref}|$) frente a la concentración de CH_4 , para tres temperaturas de fondo diferentes; mientras que la temperatura del gas permanece constante a $T_g = 280$ K y la radiancia equivalente de ruido indica el límite de detección. La figura superior no presenta iluminación externa, por lo que para $T_b = 280$ K la ausencia de contraste térmico convierte al gas en indetectable. La gráfica inferior representa el uso de iluminación externa, donde el gas puede detectarse a concentraciones menores que en el caso anterior e independientemente de la temperatura del fondo.

$T_b(K)$	CMD pasiva	CMD activa
250	18.08 %	0.81 %
270	78.22 %	0.75 %
280	-	0.69 %
290	26.82 %	0.62 %
310	1.35 %	0.43 %

Tabla 3.1: Concentración mínima detectable para los métodos activo y pasivo, en el caso de detección de CH_4 con $T_g = 280K$ para diferentes temperaturas de radiación de fondo. En todos los casos se asume que el camino óptico recorrido es 10 cm y que se emplea un sistema de imagen IR operando en el infrarrojo medio con una NETD de 50 mK @300K, y un filtro interferencial de 375 nm de ancho de banda centrado en la banda de absorción de los hidrocarburos, en $\lambda_0=3,3 \mu m$.

inclinación de 45° supondría un aumento de la concentración mínima detectable desde un valor de 0.69 %, obtenido para incidencia normal, hasta el 1.36 %.

3.2.4. Simulación de escenarios radiométricos

Los resultados obtenidos en la sección anterior serán ahora empleados para llevar a cabo una serie de simulaciones radiométricas que nos permitirán evaluar de forma gráfica y precisa las prestaciones esperables del principio de medida activo propuesto. Para ello, construiremos una escena cuya superficie de fondo queda dividida horizontalmente en una serie de temperaturas, cubriendo el rango de valores discretos $T_b= 250, 270, 280, 290$ y 310 K, ordenados de forma descendente, mientras que a todas ellos se les asigna un valor de emisividad de 0.8. Supondremos que la nube de gases que se quiere detectar queda confinada entre el fondo y la cámara, a una temperatura $T_g=280$, y con una perfil de distribución horizontal de la concentración gaussiano, de desviación típica igual a $\sqrt{2} \cdot 8$ píxeles, que varía desde $c = 100$ % en el centro de la imagen hasta $c = 0$ % en los extremos. La transmitancia espectral varía, respectivamente, entre $\tau = 0,52$ y $\tau = 1$, asumiendo que el gas seleccionado ha sido de nuevo el metano y el sistema infrarrojo es el mismo que en la sección anterior. Por último, la temperatura ambiente se considera de un valor constante e igual a $T_a=280$ K.

A partir de las simulaciones descritas, las figuras 3.6 y 3.7, representan, respectivamente, las radiancias en los modos de detección pasivo (\mathcal{L}_{off}) y activo (\mathcal{L}_{on}). En la primera de ellas, la fuga de gas ($T_g = 280K$) aparece como una nube de tonos oscuros frente al fondo blanco más caliente ($T_b = 310K$), y con tonos más claros frente a un fondo más frío ($T_b = 250K$); aunque en este caso el contraste térmico negativo proporciona un contraste radiométrico menor que para el fondo caliente. Cuando $T_b = T_g$, como ocurre en el perfil identificado como 2, el gas se vuelve invisible. Por otro lado, los perfiles obtenidos en el caso activo muestran un contraste superior independientemente del fondo seleccionado. En la tabla 3.2 se resumen los niveles de relación señal a ruido obtenidos en los casos activo

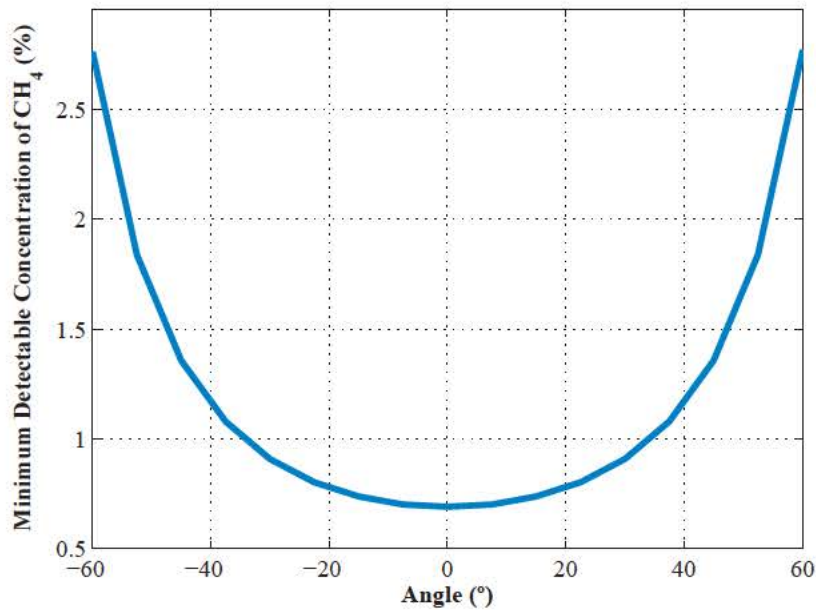


Figura 3.5: Concentración mínima detectable correspondiente a un volumen de metano de camino óptico igual a 10 cm, en función del ángulo de incidencia sobre el background.

y pasivo para cada uno de los tres perfiles seleccionados. Como ya se había comprobado en simulaciones previas, la ausencia de contraste radiométrico acentúa notablemente los beneficios del esquema activo, ya que proporciona un nivel de detectabilidad razonable mientras que un esquema de detección pasivo resultaría tremendamente limitado independientemente de las prestaciones del detector empleado.

Perfil	T_b (K)	$T_b - T_g$ (K)	SNR para $\tau = 0,52$	
			Pasivo	Activo
1	310	30	7	16
2	280	0	0	10
3	250	-30	1.5	8

Tabla 3.2: Comparación de la relación señal a ruido para la detección de metano al emplear los métodos activo y pasivo, como se describe en el texto. Los valores mostrados son calculados en el punto de máxima concentración, mínima transmitancia en las figuras 3.6 y 3.6, para un valor constante de $T_g = 280$ K.

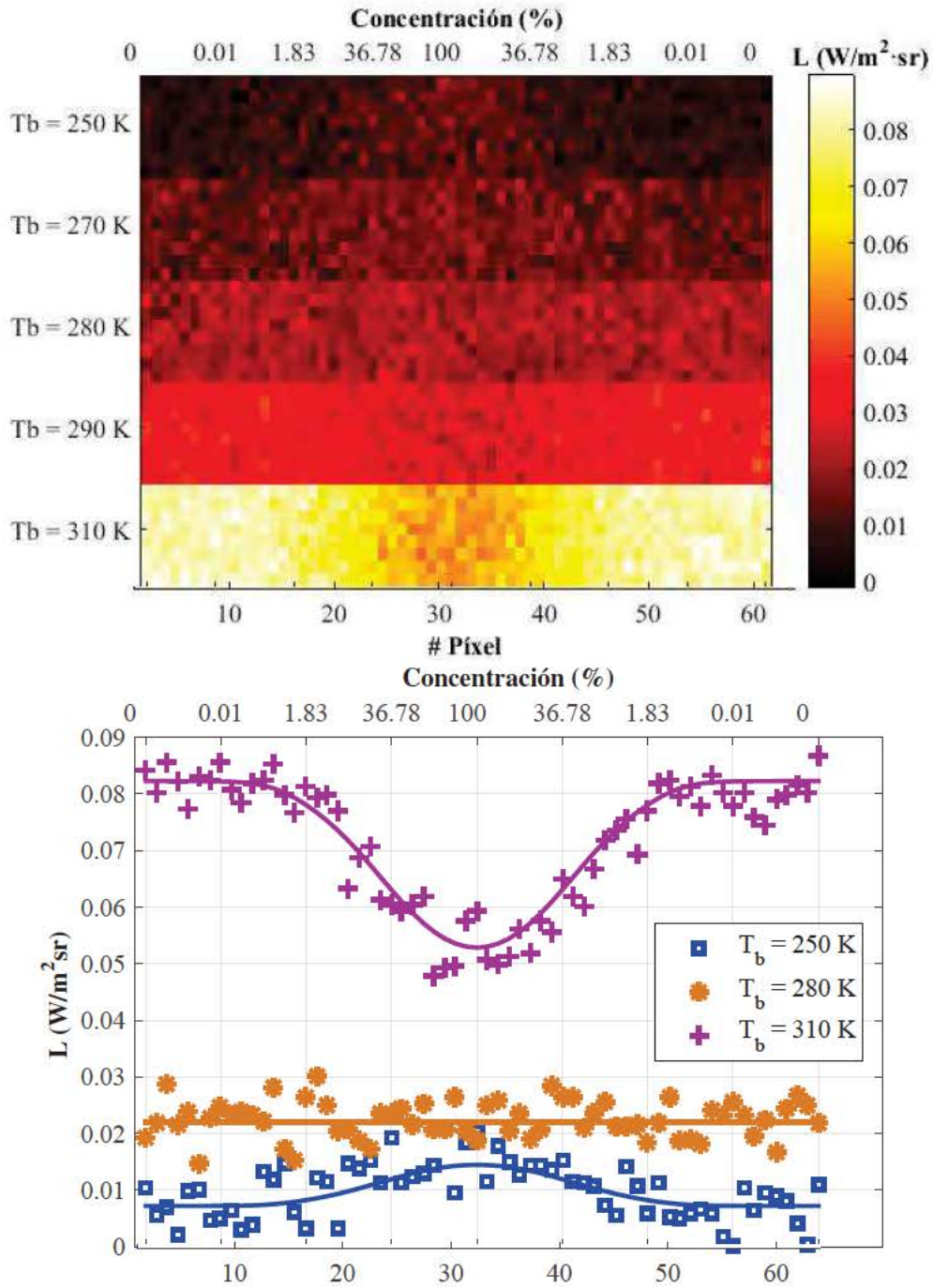


Figura 3.6: (Superior) Imagen sintética de la radiancia L_{off} , correspondiente al modo pasivo. Se distinguen 5 regiones horizontales, con temperaturas de fondo $T_b = 250, 270, 280, 290$ y 310 K (de arriba hacia abajo). Una nube de CH_4 , uniforme en la dimensión vertical, con un camino óptico de $l = 10$ cm, y con una distribución gaussiana de la concentración en la dirección horizontal. (Inferior) Se muestran los perfiles de radiancia obtenidos para tres temperaturas de fondo diferentes, donde las líneas continuas representan los valores libres de ruido experimental.

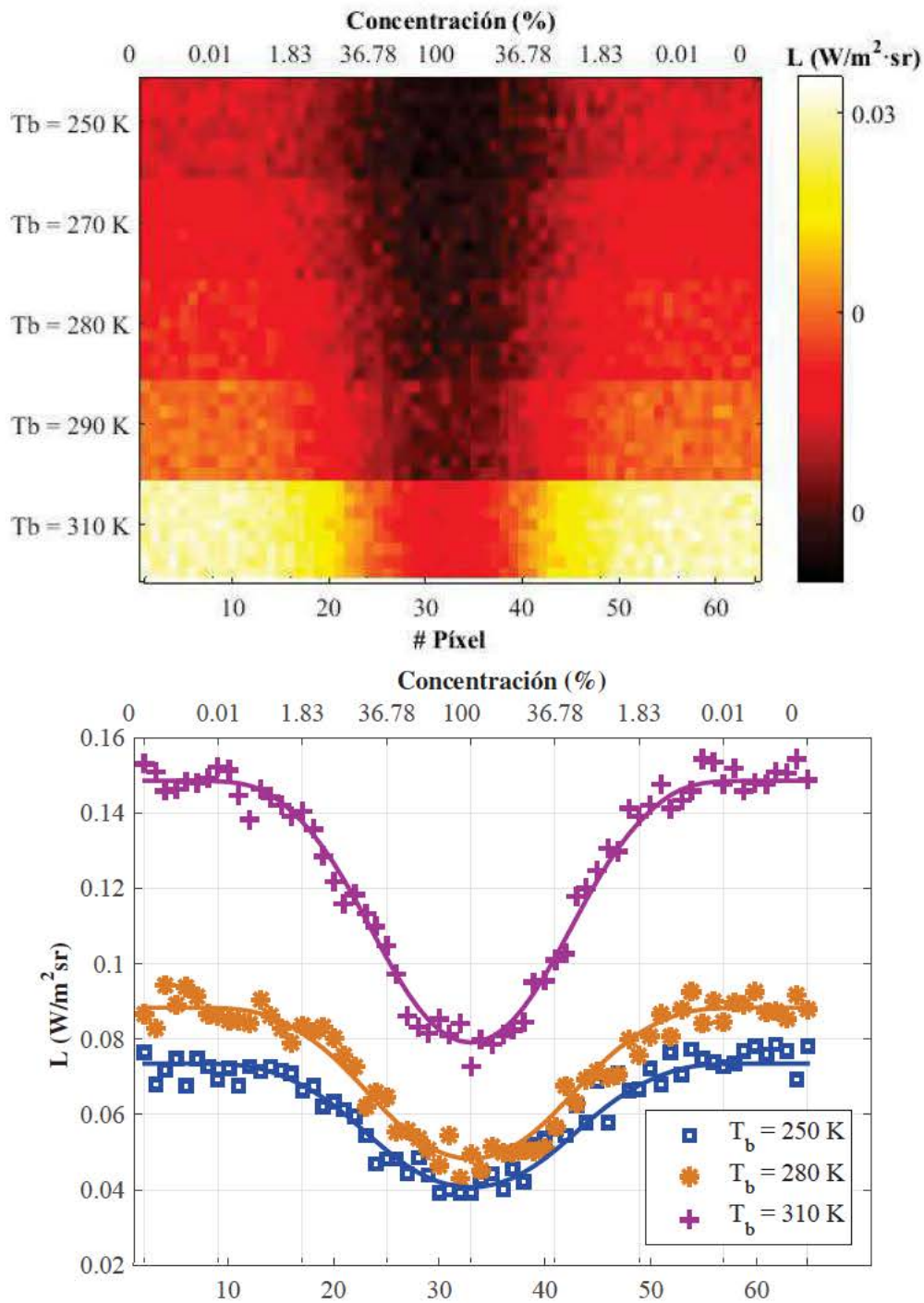


Figura 3.7: (Superior) Imagen sintética de la radiancia L_{on} correspondiente al modo activo, para las mismas condiciones descritas en la figura 3.6. (Inferior) Se muestran los perfiles de radiancia obtenidos para tres temperaturas de fondo diferentes, donde las líneas continuas representan los valores libres de ruido experimental.

3.3. Validación experimental

Una vez que hemos podido emular el comportamiento de un sistema de detección basado en el principio propuesto, resta todavía comprobar experimentalmente las hipótesis y prestaciones estimadas. Para lo cual, y debido tanto a la alta inflamabilidad del metano como a las dificultades que entraña su correcto manejo y almacenamiento, hemos seleccionado el dióxido de carbono para la realización de los siguientes tests. En este caso, el principio de detección es completamente análogo al del CH_4 , aunque sea de esperar que se añadan algunas dificultades adicionales derivadas de la presencia del gas a detectar en la atmósfera (en una concentración de aproximadamente 400 ppm).

Los ensayos realizados no pretenden llevar a cabo un análisis cuantitativo, como podría hacerse en términos de las cantidades de gas mínimas detectables, sino que tratan de mostrar la viabilidad práctica del método activo en aplicaciones reales. También es conveniente indicar que, en dichos casos, el principio de medida se ha complementado mediante el uso de técnicas de procesamiento temporal que permiten tanto la estimación de fondos como el realce de la visualización.

3.3.1. Fugas de dióxido de carbono en una tubería

Una de las aplicaciones que mayor interés industrial suscita en el campo de la tele-detección de gases es la localización de fugas en tuberías y depósitos mediante el uso de gases traza. Aquí, el uso de sistemas de imagen infrarroja se propone como una alternativa que pretende reducir de forma significativa los altos tiempos de inspección que exigen las metodologías establecidas, como las basadas en el uso de jabones industriales o detectores de helio.

La figura 3.8 muestra una tubería de gas en la que dos fugas han sido identificadas: una se localiza en una de las llaves, y la segunda se trata de una perforación en la parte inferior. La imagen presentada es el resultado de sustraer un fondo (\mathcal{L}_{ref}^{on}), estimándose de una secuencia previa a la circulación de gas, dado que sólo pretendemos comprobar las prestaciones radiométricas que incorpora la iluminación externa. La pared de fondo se encontraba a temperatura ambiente, y la fuente IR disponible se corresponde con el modelo Raymax 1330 de Watlow, con un área de $25,5 \times 15,5 \text{ cm}^2$ a 350°C y un consumo eléctrico de 110 W; y que no disponía de elemento óptico alguno que ejerciera ningún tipo de concentración de la radiancia emitida. Presuponiendo que esta sigue un diagrama de emisión lambertiano ($I = I_0 \cos \theta$), la contribución de la fuente no se encuentra adaptada al FOV del sistema de imagen IR, como asumíamos en nuestras simulaciones, lo que explica la notable diferencia de potencias entre ambas fuentes.

Para estas pruebas se ha optado por un sistema de imagen IR de distancia focal 50 mm, colocado a 2 metros del montaje. La región espectral seleccionada viene dada por un filtro interferencial centrado en 4300 nm con un ancho a mitad de altura (FWHM) de 200 nm. La presión conseguida en la tubería era sólo ligeramente superior a la atmosférica, por lo que no es posible contar con el contraste térmico fruto de la expansión adiabática. En estas condiciones las fugas encontradas serían difícilmente detectables mediante detección pasiva, produciéndose una situación análoga a la mostrada en la figura 3.2, donde la concentración mínima detectable tiene un crecimiento asintótico.



Figura 3.8: Montaje experimental basado en tuberías llenas de CO_2 , donde se muestra la detección de dos fugas mediante la configuración de iluminación activa.

3.3.2. Aplicación industrial: análisis de estanqueidad

Un caso que ejemplifica la necesidad de emplear sistemas de imagen para la detección de fugas tiene lugar durante las labores de reparación y mantenimiento de aeronaves. A día de hoy resulta difícil llegar a detectar y reparar la totalidad de fugas presentes en sus tanques de combustible, lo cual puede conllevar elevados costes si estas son detectadas una vez el depósito se encuentre lleno; ya que habría que vaciarlo y comenzar de nuevo el proceso de revisión.

Por otro lado, el laboratorio LIR-UC3M posee una dilatada experiencia en el uso de tecnología de imagen IR para el análisis de la estanqueidad de depósitos de combustible, donde el procedimiento tradicionalmente propuesto es el siguiente: se llena el depósito de un gas traza con firma infrarroja, como el dióxido de carbono, y con un sistema de imagen se observan las fugas de gas para localizar los defectos del tanque. Dicha detección había venido implementándose de forma pasiva, actuándose fundamentalmente en una selección espectral óptima así como en un procesado temporal que incrementase la sensibilidad en la medida de lo posible.

Ensayos sobre modelo de depósito a escala

Uno de los principales inconvenientes que implica la detección de gases traza es el bajo contraste térmico que estos suelen presentar con respecto al ambiente. Dado que es habitual contar con tiempos de llenado relativamente altos, si a esto le sumamos la baja capacidad calorífica de los gases, la detección tendrá lugar en condiciones próximas al equilibrio térmico. Como ya hemos comprobado a lo largo del análisis radiométrico

realizado en las secciones anteriores, es en estos casos donde la detección activa presenta un mayor atractivo, reduciendo significativamente los límites de detección.

Para ilustrar mejor esta aplicación comenzaremos realizando una serie de experimentos a escala de laboratorio sobre un dispositivo entrenador de fugas, proporcionado por la compañía EADS-CASA, actualmente Airbus. Dicho dispositivo se muestra en la figura 3.9, e incluye una válvula de entrada para el llenado con gases traza y una serie de micro-fugas controladas que utilizaremos en nuestras pruebas.

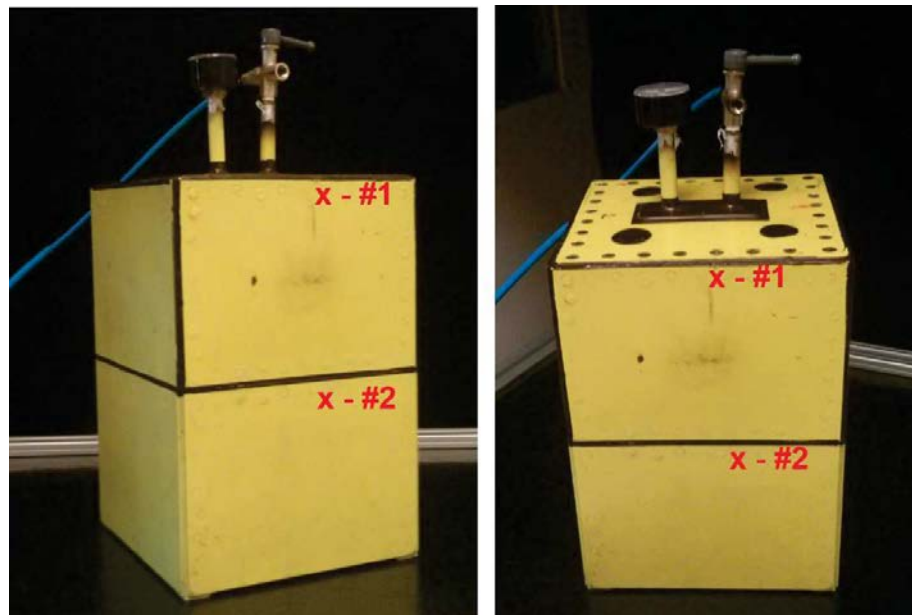


Figura 3.9: Diferentes vistas del modelo de depósito a escala empleado. En la figura se han señalado dos micro-fugas controladas (#1 y #2), que serán usadas como validación experimental de nuestra metodología.

El CO_2 , seleccionado como gas traza, se introduce en una concentración próxima al 100 % hasta incrementar la presión del depósito en 1 atm, garantizando así que la concentración resultante siga siendo lo suficientemente elevada como para permitir su detección. Hecho esto, se ha empleado el sistema de imagen IR descrito en la sección 3.3, provisto de la misma fuente de iluminación, y ubicado a una distancia de observación del orden de 1 metro.

La secuencia de imágenes infrarrojas ha sido tratada mediante un algoritmo de detección de cambios, cuyo principio de operación se basa en estimar una imagen de referencia o *background* a partir de la información espacial y temporal contenida en la secuencia, que después será sustraída. Una de las implementaciones computacionalmente más sencillas de las técnicas conocidas como *background subtraction* consiste en sustraer del *frame* actual una versión ponderada de los *frames* anteriores, como si de un filtro paso alto en el dominio temporal se tratara. En [91] es posible encontrar detalles adicionales sobre este tipo de técnicas.

La secuencia resultante del procesamiento temporal es tratada mediante operaciones morfológicas (como el algoritmo *rolling ball* inicialmente propuesto en el campo de la imagen médica, ver [120]), que nos permiten introducir en los criterios de detección la informa-

ción relativa a la estructura espacial de una fuga de gas típica; lo que sirve para reducir la probabilidad de falsa alarma. Finalmente, también se han explorado distintas formas de representación y visualización, de forma que, tanto la información correspondiente a la fuga de gases como al resto de elementos del escenario, sea preservada y permita una adecuada localización de las fugas presentes. La estrategia seguida consiste en la fusión de la secuencia original (sin procesar, aunque convenientemente normalizada y ecualizada) con el resultado del procesado de detección de gases usando una representación en el espacio de colores RGB.

En la figura 3.10 se muestra un ejemplo de detección de fugas en la que la secuencia adquirida es tratada con el procesado descrito. En el *frame* representado se observa en color rojo la presencia de CO_2 proveniente de las micro-fugas del depósito, mientras que la estructura espacial sigue apareciendo de forma intuitiva.

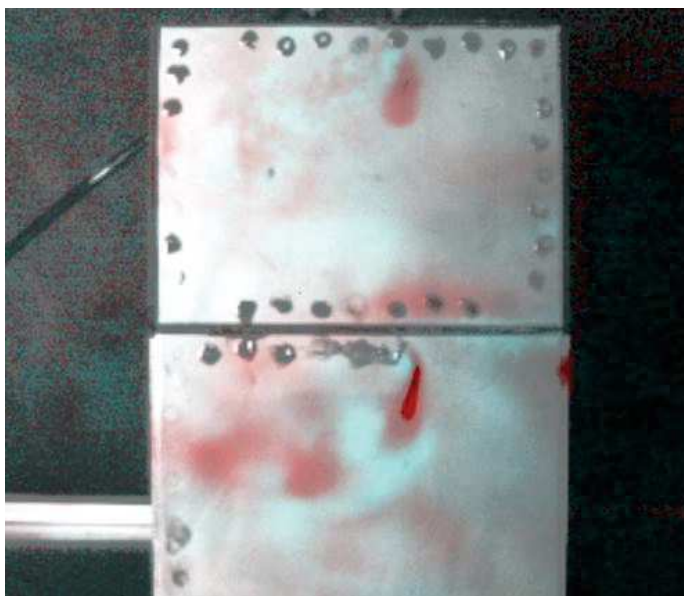


Figura 3.10: Ejemplo de detección de fugas sobre un modelo de depósito a escala, con fugas controladas. Imagen resultado de la fusión entre la imagen original y el procesado espacio-temporal.

Ensayos sobre depósitos de aeronaves

El siguiente paso es comprobar que la metodología propuesta puede ser implementada con éxito en una situación real, para lo cual se han llevado a cabo una serie de experimentos en las instalaciones de Airbus D&S (Getafe), dentro del sector de Ingeniería-MRO, sobre aeronaves en proceso de mantenimiento, donde ya se habían detectado y subsanado las fugas encontradas de acuerdo a los procedimientos establecidos.

El tanque descrito se llena mediante CO_2 hasta alcanzar una presión manométrica en el interior de 1.22 atm, que resulta en una concentración de CO_2 estimada en torno al 55 % en volumen. Dicha concentración se prevé pueda ser minimizada en aras de la reducción de costes e impacto medioambiental en procedimientos futuros. Tras el proceso de llenado y al objeto de verificar un adecuado mezclado así como una cuantificación relativa, se hizo

una medida sobre una fuga de referencia.

Los resultados obtenidos incluyen la detección y localización de dos pequeñas fugas (con bajo caudal estimado) en el interior de la pieza mostrada en la figura 3.11. El hecho de contar con un sistema de imagen permite que el instrumento desarrollado sea capaz de ubicar con exactitud la posición de las fugas detectadas. Dicha resolución espacial aporta una gran cantidad de información al operario, posibilitando discernir entre la contribución de distintas fugas presentes en el escenario de inspección; a diferencia de otras estrategias como las basadas en detectores de helio.

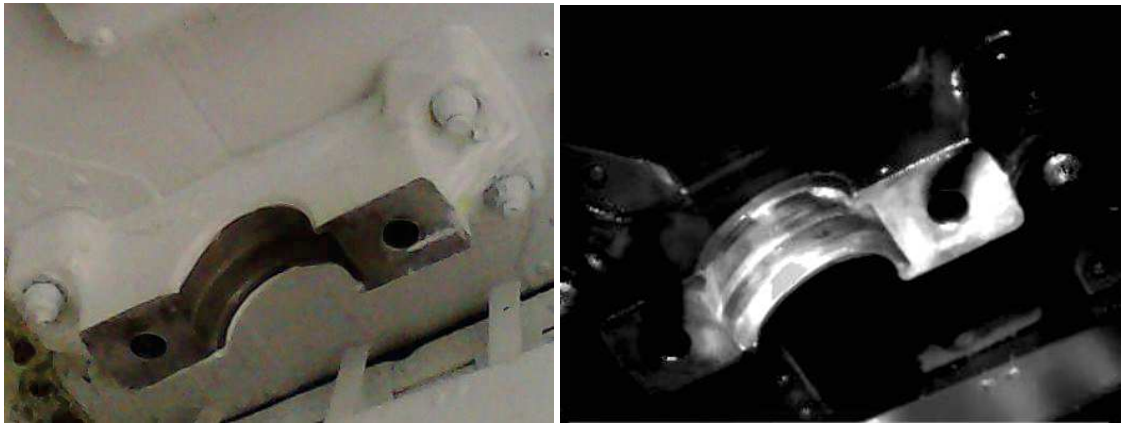


Figura 3.11: A la izquierda, imagen visible correspondiente a la pieza con presencia de fugas. La imagen de la derecha representa una imagen procesada de la secuencia obtenida, en la que se observa el gas traza emanar de la región.

PARTE II:

IMAGEN HIPERESPECTRAL EN EL INFRARROJO MEDIO MEDIANTE TRANSFORMADA DE FOURIER

Imagen hiperspectral mediante espectrometría FTIR

Una vez tratado el problema de la detección de gases en los capítulos 2 y 3, nos encontramos en disposición de abordar uno de los objetivos centrales de este trabajo: la cuantificación a distancia de compuestos cuya temperatura no es conocida. Como ya explicábamos en los apartados 2.4.4 y 2.5.4, esto representa un caso particularmente complejo por el problema de la separabilidad entre emisividad y temperatura, dado que, en el caso de gases calientes, es preciso considerar la dependencia térmica de la emisividad (a través del coeficiente de absorción). Esto supone una complejidad adicional al introducir un acoplamiento entre variables.

Tratar de resolver este inconveniente requiere de un requisito indispensable: resolución espectral suficiente como para observar con la necesaria precisión la estructura fina de los compuestos bajo análisis. Por este motivo los sistemas de imagen monobanda, que proporcionaban el nivel de energía integrado en un ancho espectral relativamente amplio, ya no serán adecuados para abordar nuestro objetivo, y necesitaremos sistemas con un mayor grado de sofisticación: los dispositivos de imagen hiperspectral; en nuestro caso, basados en espectrometría de transformada de Fourier (*Fourier Transform Infra-Red*, FTIR).

Las técnicas espectrométricas basadas en transformada de Fourier se ocupan del análisis o la síntesis de señales mediante su descomposición en componentes frecuenciales puras. Podemos encontrar aplicaciones en una gran variedad de ámbitos [55], como el estudio de la región infrarroja del espectro mediante espectrometría FTIR, o la resonancia nuclear magnética (NMR) y de spin electrónico (ESR), ampliamente utilizadas en el diagnóstico y tratamiento de enfermedades. A lo largo de este capítulo nos centraremos en la primera de ellas, la espectrometría FTIR, que emplea diferentes configuraciones de medida para obtener parámetros de absorción, emisión, reflexión e incluso fotoacústicos, siempre mediante la síntesis de un interferograma óptico.

Aunque el auge de esta tecnología está motivado por diversas razones (que pueden encontrarse en [55]), una de las primordiales consiste en la gran amplitud del intervalo espectral sobre el que puede ser empleada, abarcando las regiones ultravioleta, visible e infrarroja del espectro electromagnético. En contraposición al uso de técnicas de carácter dispersivo (como es el caso de las redes de difracción), que abarcan regiones espectrales mucho más limitadas, la espectroscopia FTIR puede emplearse en análisis de carácter exploratorio, cuando se desconocen las sustancias que se encuentran presentes en una

muestra. Además, se caracteriza por una elevada velocidad y sensibilidad: Fellgett expuso como el multiplexado óptico fruto de la adquisición simultánea de todas las longitudes de onda se traducía en una mejora significativa de la relación señal a ruido, en lo que se conoce como *ventaja de Fellgett* [24]. A lo que hay que sumar el aumento de sensibilidad debido a que el *throughput* obtenido (el producto del ángulo sólido recogido por el equipo y el área del elemento detector) es mucho mayor del que dispondría un monocromador de resolución similar, como demostró poco tiempo después Pierre Jaquinot [34].

Pese a la superioridad que en cuanto a prestaciones radiométricas ostentaba la tecnología FTIR, su despegue definitivo no se inició hasta los avances que sobrevinieron en la década de los años 60, cuando Cooley y Tukey propusieron el uso de nuevos algoritmos para la implementación de la transformada discreta de Fourier, naciendo la conocida como *Fast Fourier Transform*. Este hecho, unido al vertiginoso aumento de la capacidad de computación que siguió, gracias al desarrollo de la microelectrónica, terminó por generalizar su uso frente a los sistemas dispersivos.

Comenzaremos este capítulo describiendo los principios básicos que rigen el funcionamiento de los dispositivos FTIR, para lo que tomaremos como ejemplo una arquitectura basada en el interferómetro de Michelson. Tras esto, pasaremos a describir el sistema de imagen hiperespectral Telops FIRST-MW, el cual representa la confluencia entre la espectrometría FTIR convencional y los dispositivos de imagen infrarroja, gracias al acoplamiento de un interferómetro de Michelson a un array de detectores (InSb) operando en la región del infrarrojo medio extendido (de 1,5 a 5,5 μm), y que alcanza resoluciones espectrales similares a sistemas de análisis FTIR empleados en espectrometría *Open-Path* [34], del orden de 0,25 cm^{-1} . Esta rama de la espectroscopia ha venido evolucionando durante las dos últimas décadas, y supone un salto cualitativo en lo referente a la funcionalidad y aplicabilidad a nuevos problemas en relación con los dispositivos tradicionales.

El presente capítulo tiene como objetivo llevar a cabo una descripción pormenorizada del instrumento de medida, dado el impacto que en las medidas experimentales supone una correcta puesta a punto de este sistema, tanto a nivel de configuración *hardware* como para establecer el flujo de procesado más adecuado para nuestra aplicación particular.

4.1. Espectroscopía FTIR: interferómetro de Michelson

Una gran parte de los interferómetros en el rango IR disponibles hoy día se basan en el interferómetro que Albert A. Michelson [55] diseñó con el objetivo de determinar la velocidad de la luz, allá por finales de la década de 1880. Posteriormente, Michelson recibió el Premio Nobel de Física en 1907 por su exactitud en la medida de la velocidad de la luz y sus contribuciones en el diseño de instrumentos ópticos de alta precisión. Pese a que el diseño original fue sufriendo modificaciones con el paso del tiempo y su uso continuado en aplicaciones específicas (surgiendo nuevos diseños como el de Fabry-Perot, *lamellar grating*,... entre muchos otros), su estudio nos ayudará a comprender los conceptos más generales de la interferometría, y presenta una aplicación directa en este trabajo, dado que el núcleo del sistema de imagen hiperespectral que emplearemos está conformado por un interferómetro de Michelson de funcionamiento equivalente al que se describe en la figura 4.1. En ella, el haz de entrada se divide en dos mediante un *beamsplitter* (O) y se introduce una diferencia de camino óptico entre ambos haces gracias a la posición

variable de uno de los espejos (M). Cuando estos son de nuevo recombinados resultan en una señal de interferencia, sensible a la diferencia de camino óptico entre los trayectos recorridos.

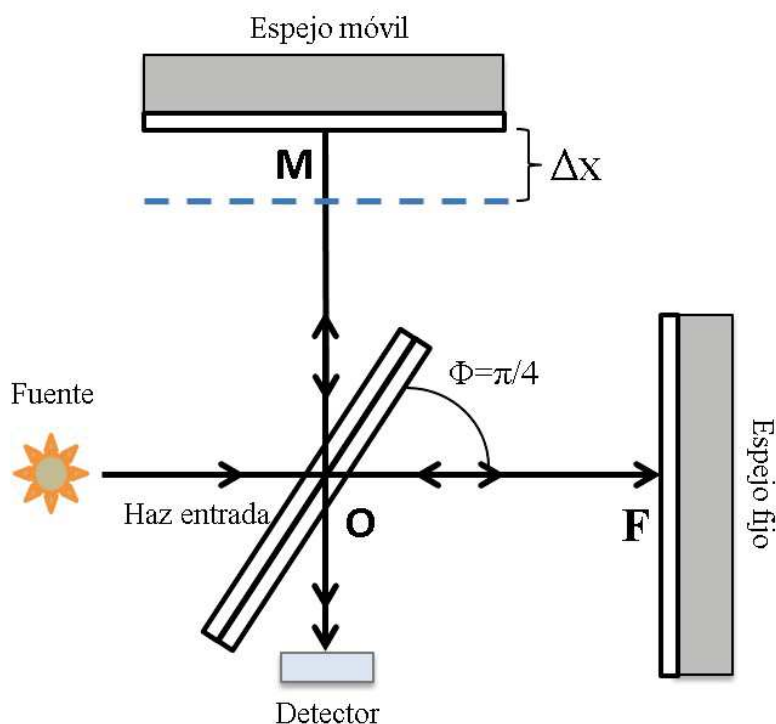


Figura 4.1: Ilustración de un interferómetro de Michelson, componentes principales y esquema de recombinación de los haces.

Para poder realizar un análisis pormenorizado de este instrumento, se distinguirán dos casos de estudio, comenzando con el uso de fuentes de radiación monocromáticas y posteriormente extendiendo el desarrollo a fuentes policromáticas, que presentan radiación a lo largo de cierto ancho de banda y son las que emplearemos en la práctica.

4.1.1. Fuentes de luz monocromática

Sin abandonar la figura 4.1, en este primer caso supondremos una fuente de luz ideal con una única componente frecuencial que definiremos por su número de onda ν , inverso de la longitud de onda ($\nu = \frac{1}{\lambda}$), y donde el resto de elementos ópticos como el divisor de haz (*beamsplitter*) y los espejos también serán considerados como ideales, asumiendo que el haz se divide en un 50 % a lo largo de cada dirección y que no se producen pérdidas de ninguna naturaleza.

Si la distancia entre el divisor de haz y cada uno de los espejos es idéntica, no se producirá diferencia de fase alguna entre ambos haces y al ser recombinados darán lugar a la intensidad de la señal de entrada, obteniéndose una interferencia constructiva. Al contrario, si desplazamos el espejo variable se producirá una diferencia de camino óptico

entre ambos trayectos igual al doble de la diferencia entre las distancias del *beamsplitter* al espejo fijo y al variable. De la figura 4.1, se obtiene para $\Delta x = \frac{\lambda}{4}$ una diferencia de camino óptico (x) igual a:

$$x = 2 \cdot \Delta x = 2 \cdot (OM - OF) = 2 \cdot \frac{\lambda}{4} = \frac{\lambda}{2} \quad (4.1)$$

Lo que se traduce en un desfase de $\delta = \pi$ que provocará una interferencia destructiva en el detector, de forma que la intensidad finalmente detectada será, idealmente, nula. Teniendo en cuenta este comportamiento, es sencillo encontrar la señal interferencia $I'(x)$ obtenida para cualquier valor de x a partir de la recombinación de los dos haces.

Sea la expresión del campo eléctrico E asociado a la radiación electromagnética (monocromática) entrante en el interferómetro la siguiente [60]:

$$E = E_0 \cdot e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (4.2)$$

donde E_0 es su amplitud, \vec{k} es el vector de números de onda angular (cuyo módulo viene dado por $|\vec{k}| = 2\pi\nu$), \vec{r} es el vector que indica la dirección de propagación, ω es su frecuencia angular y t es la variable tiempo.

La recombinación de ambos haces provenientes de los dos brazos del interferómetro, entre los cuales existe una cierto desfase $\delta = \frac{2\pi x}{\lambda} = 2\pi\nu x$ debido a la diferencia de camino óptico recorrido x , se reduce a la interferencia entre las expresiones correspondientes a E_1 y E_2 :

$$\begin{aligned} E_1 &= E_{01} \cdot e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ E_2 &= E_{02} \cdot e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta)} \end{aligned}$$

La expresión del campo total resultante E_T a la entrada del detector será:

$$E_T = E_1 + E_2 = \left[E_{01} \cdot e^{j\vec{k} \cdot \vec{r}} + E_{02} \cdot e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r} + \delta)} \right] e^{-j\omega t} \quad (4.3)$$

Sin embargo, no es posible encontrar detectores ópticos que alcancen a medir de forma directa el campo eléctrico, y lo habitual es que su respuesta sea proporcional a la intensidad de la onda incidente, entendida ésta como el cuadrado del módulo del campo eléctrico promediado en el tiempo, dado que las variaciones temporales serían órdenes de magnitud más rápidas que el tiempo de respuesta del detector; lo que nos lleva a que la señal es:

$$I = \langle |E_T|^2 \rangle = \langle E_T \cdot E_T^* \rangle = \langle |E_1|^2 \rangle + \langle |E_2|^2 \rangle + \langle E_1 \cdot E_2^* \rangle + \langle E_1^* \cdot E_2 \rangle \quad (4.4)$$

Si denotamos $I_1 = \langle |E_1|^2 \rangle = E_{01}^2$ y $I_2 = \langle |E_2|^2 \rangle = E_{02}^2$ y calculamos:

$$\langle E_1 \cdot E_2^* \rangle + \langle E_1^* \cdot E_2 \rangle = E_{01} E_{02} \cdot 2 \cos \delta = 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(2\pi\nu x) \quad (4.5)$$

obtenemos la expresión que habitualmente podemos encontrar en la literatura:

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(2\pi\nu x) \quad (4.6)$$

Si suponemos un comportamiento ideal del interferómetro, $I_1 = I_2 = \frac{I_0}{4}$, y la señal medida en el detector, en función de la diferencia de camino óptico entre los haces, x , será:

$$I'(x) = \frac{1}{2} I_0(\nu) \cdot \{1 + \cos(2\pi\nu x)\} \quad (4.7)$$

En dicha expresión podemos distinguir dos términos, una componente continua (DC) y otra alterna (AC). A esta última es a lo que comúnmente se denomina interferograma ($I(x)$):

$$I(x) = \frac{1}{2} I_0(\nu) \cdot \cos(2\pi\nu x) \quad (4.8)$$

En el caso no ideal, $I_1 \neq I_2$, la componente continua del interferograma ya no es igual a la amplitud de componente variable, y habrá que tenerlo en cuenta cuando analicemos interferogramas experimentales.

Por otra parte, es habitual ignorar la componente continua del interferograma, dado que a priori no parece aportar ningún tipo de información relevante, hasta el punto de que muchos equipos llegan a suprimirla mediante filtros electrónicos en la etapa de pre-procesado *hardware*. Sin embargo, existen situaciones en las que el término de continua sí puede ser relevante, como cuando se producen fluctuaciones temporales de la radiación entrante, fenómeno que será tratado en el capítulo 9, motivo por el cual mantendremos su presencia en la versión completa del interferograma que denotaremos como $I'(x)$.

4.1.2. Fuentes de luz policromática

Cuando la radiación entrante en el interferómetro posee múltiples componentes frecuenciales o, en general, un determinado ancho de banda espectral continuo, el interferograma resultante consistirá en la suma de los interferogramas correspondientes a cada frecuencia, puesto que es un sistema lineal. Esto se traduce en la siguiente expresión integral:

$$I'(x) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \mathcal{L}(\nu) \cdot (1 + \cos(2\pi\nu x)) d\nu \quad (4.9)$$

donde $\mathcal{L}(\nu)$ representa la intensidad espectral entrante en el interferómetro. Y prescindiendo de la parte continua, se obtiene:

$$I(x) = \int_0^{+\infty} \mathcal{L}(\nu) \cdot \cos(2\pi\nu x) d\nu \quad (4.10)$$

donde el punto $x = 0$ se corresponde con el valor de intensidad máximo, denominado en la literatura como ZPD (*Zero Path Difference*), mientras que fuera de esta posición aparecen las oscilaciones características debidas al término coseno.

Si replicamos la información espectral de forma simétrica sobre las frecuencias negativas, esto es, definiendo $\mathcal{L}(-\nu) \equiv \mathcal{L}(\nu)$, entonces podremos expresar el interferograma en términos de su transformada de Fourier inversa:

$$I(x) = \frac{1}{2} \mathcal{F}_c[\mathcal{L}(\nu)] = \frac{1}{2} \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{L}(\nu)] = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L}(\nu) e^{j2\pi\nu x} d\nu \quad (4.11)$$

donde \mathcal{F}_c y \mathcal{F}^{-1} son la transformada de Fourier en coseno e inversa (compleja) respectivamente. Análogamente, el espectro así definido vendría dado por la transformada de Fourier del interferograma:

$$\mathcal{L}(\nu) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} I(x) e^{-j2\pi x\nu} dx \quad (4.12)$$

Aunque toda la información espectral puede obtenerse a partir de una única rama del interferograma (de 0 a infinito en la integral), esta formulación es mucho menos restrictiva. El uso de la transformada de Fourier compleja resulta matemáticamente más cómodo, y permite expresar posibles pérdidas de simetría en el interferograma (algo habitual en la práctica) mediante la aparición de una componente imaginaria proporcionada por el término en seno, ya que la transformada de Fourier de una función par es real, la de una función impar, imaginaria, y la de una función genérica tendrá las dos componentes, real e imaginaria.

Relacionar el dominio espectral con el del interferograma mediante la transformada de Fourier, nos permite emplear algunas de sus propiedades para así interpretar de forma intuitiva ciertas operaciones. Es el caso de la propiedad de traslación, de la que haremos uso en secciones posteriores, y que determina que un desplazamiento arbitrario a sobre $f(x)$ introduce un término de fase lineal con la frecuencia:

$$\begin{aligned} f(x) &\xrightarrow{\mathcal{F}} F(\nu) \\ f(x - a) &\xrightarrow{\mathcal{F}} e^{-j2\pi a\nu} F(\nu) \end{aligned}$$

4.1.3. Parámetros de interés

El tratamiento idealizado que hemos realizado hasta aquí tiene que modificarse para tener en cuenta que, en la práctica, los interferogramas adquiridos tendrán siempre una longitud finita puesto que x vendrá limitado por el recorrido máximo del espejo. Además, se obtienen mediante un proceso de digitalización o muestreo del interferograma ideal $I'(x)$ realizado a una determinada tasa, motivo por el cual emplearemos la transformada de Fourier discreta o DFT.

Un ejemplo de interferograma experimental se muestra en la figura 4.2, donde se aprecia el efecto del muestreo en el aspecto quebrado de la línea. (Hay que señalar también que la señal obtenida es amplificada mediante un circuito inversor, lo que provoca que el máximo de la señal interferométrica en realidad se corresponda con el punto de menor amplitud, a diferencia, por ejemplo, de la gráfica mostrada en la figura 4.10, donde se muestra un interferograma calculado de forma teórica).

Ambos aspectos, el desplazamiento finito y el muestreo, son determinantes en la definición de las figuras de mérito del instrumento:

- **Frecuencia de muestreo.** Puesto que el interferograma medido es una discretización del interferograma ideal, se deberá seleccionar la frecuencia de muestreo adecuada. El criterio de Nyquist [88] establece que la frecuencia de muestreo ν_s debe ser al menos el doble de la máxima frecuencia espacial presente en el interferograma.

$$\nu_s \geq 2 \cdot \nu_{max} \quad (4.13)$$

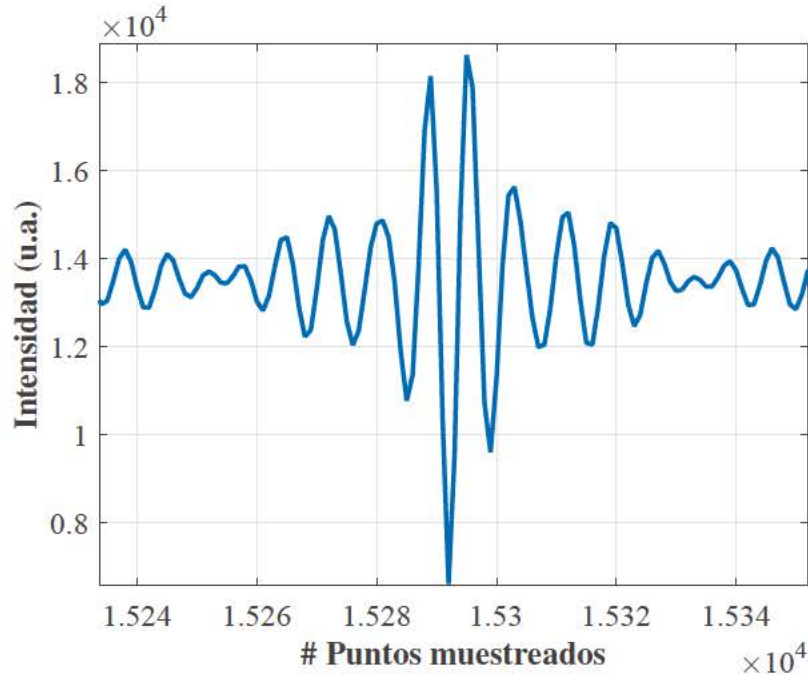


Figura 4.2: Ejemplo de interferograma experimental en torno a la posición del máximo, esto es, para pequeñas diferencias de camino óptico. El máximo corresponde al punto en el que la diferencia de camino es nula (Zero Path Difference, ZPD).

Es necesario aclarar que este criterio considera que el ancho de banda de la señal a muestrear es continuo desde la frecuencia cero hasta la máxima, por lo que esta condición podrá relajarse (sin incurrir en el temido *aliasing* o solapamiento espectral [88]) en el caso de señales paso banda. Lo veremos en el capítulo 7, donde se explica que el hecho de que la señal de entrada tenga una frecuencia mínima hace que la condición de Nyquist implique un sobremuestreo, del que nos valdremos para proponer una alternativa de uso más eficiente de la señal del interferograma.

Puesto que la frecuencia de muestreo es crítica, es habitual el uso de láseres que permitan medir con alta precisión esta magnitud. Suele usarse el haz de luz de un láser de HeNe, introducido en el interferómetro, para sincronizar la adquisición con sus máximos de interferencia (la diferencia de camino entre muestras sucesivas es $\lambda_{\text{HeNe}} = 632,816 \text{ nm}$ lo que da lugar a $\nu_{\text{max}} = 7874 \text{ cm}^{-1}$, que equivale a $\lambda_{\text{min}} = 1,27 \mu\text{m}$).

- **Resolución máxima aparente.** En nuestro caso, el interferograma está definido en el intervalo $(-x_{\text{max}}, x_{\text{max}})$ lo que da lugar a una función de periodo $2x_{\text{max}}$. El espectro que se obtenga al hacer su transformada de Fourier será por tanto discreto, con puntos espaciados un valor $\Delta\nu$ dado por:

$$\Delta\nu = \frac{1}{2 \cdot x_{\text{max}}} = \frac{1}{T_s \cdot N} \quad (4.14)$$

donde T_s es el periodo de muestreo ($T_s = \frac{1}{\nu_s}$) y N es el número total de muestras

del interferograma.

- **Forma de línea instrumental.** Un tratamiento más preciso del efecto del recorrido limitado del espejo móvil puede llevarse a cabo en términos del interferograma adquirido, ya que éste puede ser entendido como una versión enventanada, $I_W(x)$, del interferograma ideal:

$$I_W(x) = \begin{cases} I(x) & \text{si } -x_{max} \leq x \leq x_{max} \\ 0 & \text{si } x > |x_{max}| \end{cases}$$

Esta última expresión puede interpretarse como el efecto de multiplicar el interferograma ideal por una función rectangular. Lo que, en el dominio de la frecuencia, se traduce en una operación de convolución entre el espectro ideal ($\mathcal{L}_0(\nu)$) y la transformada de Fourier de la función de enventanado, que en este caso se corresponde con una señal de tipo *sinc* (figura 4.5). A esta última se la denomina forma de línea instrumental (*Instrumental Line Shape*, ILS). El espectro medido resultaría en:

$$\mathcal{L}(\nu) = \mathcal{L}_0(\nu) * \text{ILS}(\nu) = \mathcal{L}_0(\nu) * \{2x_{max} \cdot \text{sinc}(x_{max} \cdot \nu)\} \quad (4.15)$$

Es común emplear la ILS para establecer la resolución real del interferograma medido. La resolución se obtiene como el ancho de banda a mitad de altura (criterio -3 dB o *Full Width at Half Maximum*), que en el caso de una función *sinc* es:

$$\Delta\nu_{ideal} = \frac{1,2}{T_s \cdot N} \quad (4.16)$$

Las expresiones anteriores presuponen que se ha utilizado una función de enventanado de tipo rectangular. Pero es posible utilizar otras funciones como veremos en la sección 4.2.2 y habrá que modificar de acuerdo a éstas tanto la ILS como la resolución alcanzada.

4.2. Espectros a partir de interferogramas

Aunque en principio basta hacer la transformada de Fourier del interferograma para obtener el espectro, en la práctica hay una serie de técnicas de procesamiento espectral que tradicionalmente han sido empleadas en el campo de la espectroscopia FTIR. Son herramientas que pretenden mejorar la relación señal a ruido de los espectros obtenidos (*simetrización*, *apodización* y *corrección de fase*), realzar ciertas características de interés (*padding* y *apodización*) y sustraer artefactos inherentes al principio de medida de la señal interferométrica en el caso particular de la formación de imagen, como la *corrección del eje óptico*.

Antes de continuar con la descripción de dichas técnicas, cabe decir que todos los procesos descritos a continuación han sido desarrollados en el marco del presente trabajo, programados en el entorno de desarrollo Matlab, y que pueden aplicarse de forma genérica a cualquier interferómetro basado en transformada de Fourier. Esto nos permite controlar todas las etapas de procesamiento (lo que en ocasiones no es posible cuando se trabaja con interferómetros comerciales) y adaptar cada una de ellas a las peculiaridades de nuestra aplicación.

4.2.1. Simetrización

Dada la característica simetría par que se presupone a los interferogramas ideales, es habitual que durante el proceso de adquisición no se tome el mismo número de puntos para las dos ramas, a ambos lados del máximo, por lo que una de ellas puede alcanzar diferencias de camino óptico mucho mayores (ver figura 4.3). Algunos instrumentos sólo presentan este comportamiento por encima de una determinada resolución espectral, a partir de la cual sólo una de las dos ramas se incrementa. Con esta maniobra se reducen por un lado las dimensiones del interferómetro, y, por otro, el tiempo de adquisición y el volumen de datos. En última instancia sería suficiente muestrear una sola rama del interferograma¹, reduciendo así el número de puntos a prácticamente la mitad (no exactamente a la mitad dado que, como veremos más adelante, es necesario que el máximo no esté en el extremo exacto del recorrido para descontar así ciertos errores de muestreo).

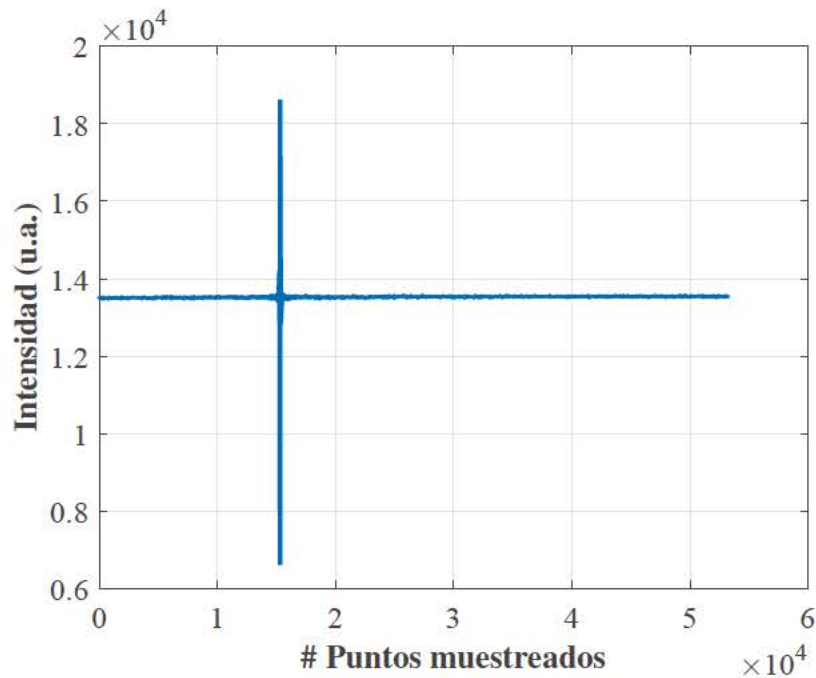


Figura 4.3: Ejemplo de interferograma asimétrico, en la que sólo una de las dos ramas alcanza el número de puntos suficiente para la resolución requerida.

Un interferograma asimétrico tiene una transformada de Fourier con una importante componente imaginaria. Como el espectro es por definición real, esta componente es puramente un artefacto matemático. La mejor manera de eliminarla es *simetrizando* el interferograma (y veremos en la sección 4.2.4 que eso va a redundar también en una mejora de la relación señal a ruido).

Ante la ausencia de puntos muestreados, forzaremos la simetría del interferograma partiendo de la condición inherentemente simétrica del interferograma real, duplicando

¹En inglés *Single Sided Interferogram*, en contraposición a los interferogramas simétricos o *Double Sided Interferograms*.

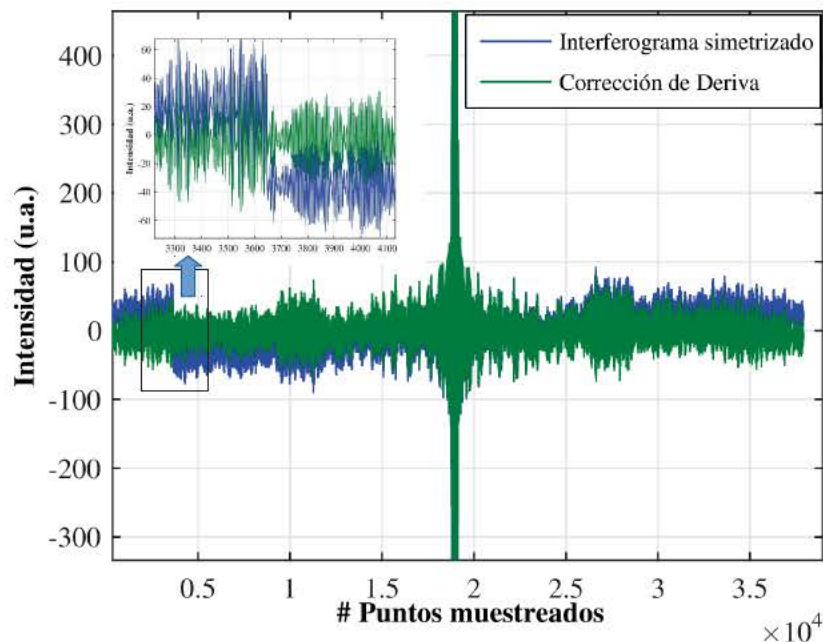


Figura 4.4: Ejemplo de interferograma simetrizado en el que se observa la deriva sufrida por este en su línea base, lo que provoca el salto brusco en los niveles al concatenar ambas ramas.

los puntos no registrados y concatenándolos con el interferograma original, tal y cómo se observa en trazo azul en la figura 4.4. En ella también se observa como el interferograma experimental presenta un nivel de continua u *offset* con una ligera variación (deriva) que se hace más notoria tras la concatenación, apreciándose un cambio brusco en los niveles. Esta deriva ha de corregirse para que al hacer la transformada de Fourier no se produzcan artefactos que se trasladen a todo el dominio espectral. En la figura 4.4, en trazo verde, también se comprueba como este efecto puede reducirse de forma notable mediante la estimación y posterior sustracción de una línea base lineal.

En este caso, las derivas en los niveles de continua no suponen una variación sustancial, y no habrían tenido ningún impacto sin la simetrización. Sin embargo, pueden darse situaciones en las que la radiación entrante al interferómetro fluctúe, y provoque alteraciones temporales difíciles de eliminar, para lo que requeriremos de un procesamiento de mayor complejidad, como se explicará en el capítulo 9.

4.2.2. Apodización

Tal y como se explicó al tratar la forma de línea espectral (ILS), el espectro medido consiste en la convolución del espectro real con la función ILS, que se corresponde con la transformada de Fourier de la función rectangular, tal y como se muestra en la figura 4.5. En ella se observa como la función *sinc* resultante presenta un elevado número de oscilaciones y pasos por cero. La convolución del espectro ideal con esta función favorece la aparición de lóbulos secundarios que pueden alterar notablemente el espectro original

sobre todo cuando (como en el caso de los gases) consta de muchas líneas estrechas y próximas.

Con el objetivo de paliar en la medida de lo posible este efecto, se recomienda emplear funciones de enventanado que magnifiquen la relación entre el lóbulo principal y los secundarios y reduzcan las oscilaciones [34]. Se trataría de multiplicar el interferograma por una función diferente de la rectangular, como puede ser la función triangular, de Hamming, de Hann, etc, pese a que con su incursión se produzca cierta degradación de la resolución espectral. Esta técnica es lo que se conoce como *apodización*². En la figura 4.5 se muestra un ejemplo de ventana triangular donde se aprecia una fuerte disminución de la amplitud de los lóbulos secundarios así como cierta pérdida de resolución.

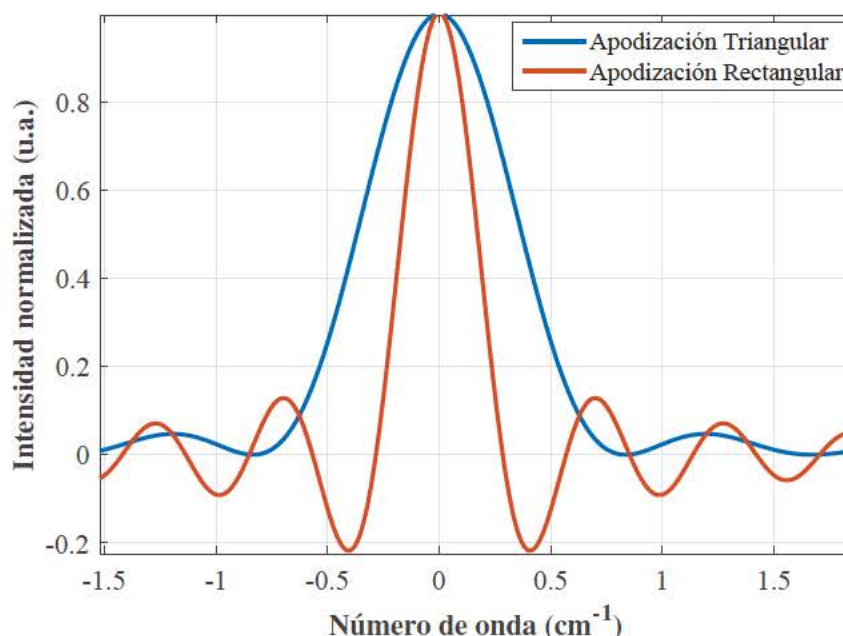


Figura 4.5: Efecto de la apodización en la ILS. Con el enventanado rectangular la ILS es una función *sinc*, mientras que con el triangular es *sinc*². Se observa una reducción de los lóbulos secundarios a costa de una pérdida de resolución en un factor 1,47 en comparación con la transformada de Fourier de la función rectangular.

Dichos efectos quedan patentes en las figuras 4.6 y 4.7, donde se compara un espectro experimental de CO_2 obtenido mediante la apodización triangular con el espectro correspondiente al interferograma sin apodizar. Se comprueba como el espectro apodizado presenta menos oscilaciones así como una mayor relación señal a ruido, a costa de un ligero empeoramiento en la resolución espectral.

La apodización puede llevarse a cabo en ambos dominios, el espectral o el del interferograma. Puesto que en este último se traduce en una simple multiplicación, en lugar de en una operación de convolución, es más recomendable aplicarla en esta etapa de proce-

²Término que viene de la expresión griega que significa "sustraer los pies", en relación a las oscilaciones características de la función *sinc*.

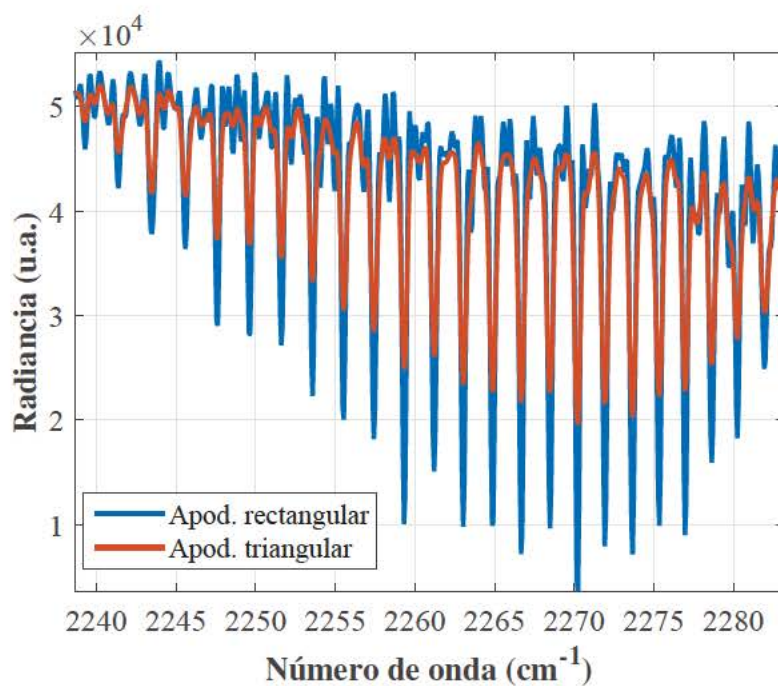


Figura 4.6: Comparativa de espectro experimental apodizado mediante ventana triangular frente a espectro original sin apodizar.

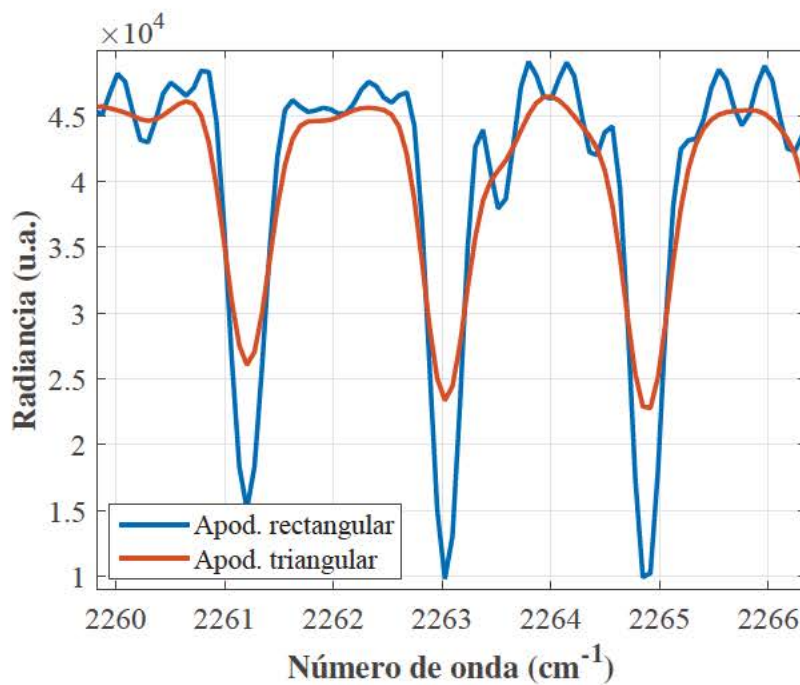


Figura 4.7: Detalle de la figura 4.6 en la que se muestran las diferencias producidas por el efecto de la apodización triangular de la figura 4.5.

sado debido a que supone una menor carga computacional.

4.2.3. Inserción de ceros o padding

En la mayoría de ocasiones los puntos obtenidos en el espectro no coincidirán con la posición de todas las líneas de absorción en las que se está interesado, surgiendo la necesidad de interpolar. Esto puede hacerse de varias maneras, pero la estrategia más recomendable consiste en lo que se denomina *padding* o prolongación del interferograma añadiéndole ceros, definiéndose el *factor de padding* (FP) como la relación entre el número de puntos añadidos y los que tenía inicialmente el interferograma. De esta forma tras aplicar la transformada de Fourier se obtendrá una mayor densidad de puntos y resolución aparente (como se explicó en 4.1.3), que conviene no confundir con el concepto de resolución espectral, esto es, la mínima separación existente entre dos líneas espectrales tal que estas puedan ser distinguidas.

Tras la prolongación del interferograma medido con ceros, el interferograma resultante estará compuesto por las muestras originales, linealmente independientes y que conforman la información espectral, junto a una serie de puntos nulos, linealmente dependientes y que proporcionan puntos interpolados en el espectro resultante. En la figura 4.8 se pueden comprobar en el espectro calculado los efectos de introducir diferentes factores de *padding*, donde se aprecia cómo los puntos interpolados reconstruyen de forma óptima la estructura espectral contenida en el interferograma.

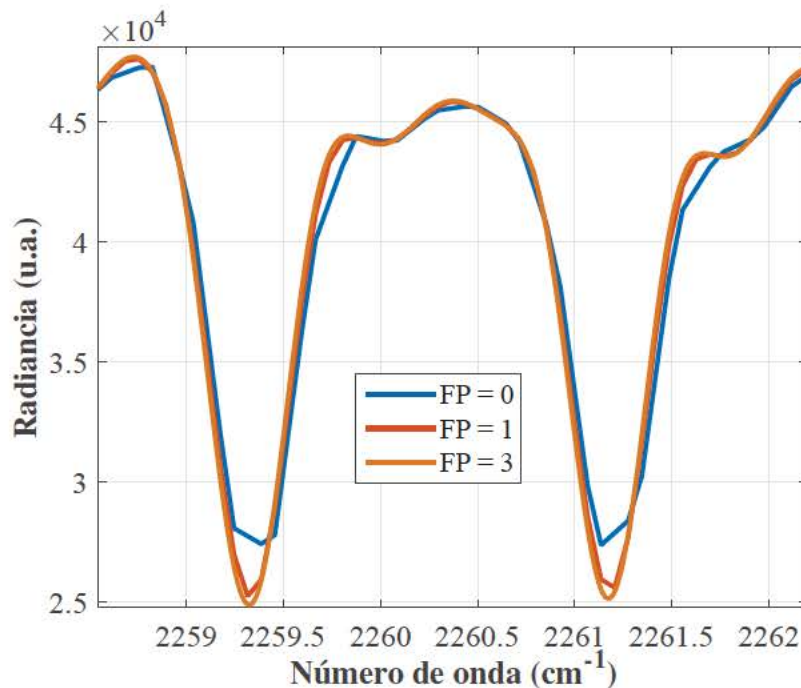


Figura 4.8: Comparativa de espectros experimentales generados a partir de distintos valores del factor de padding (FP).

4.2.4. Corrección de fase

Como se ha señalado repetidamente, la señal interferométrica (expresión 4.9) ha de tener un comportamiento simétrico con respecto a su máximo (en la posición de diferencia de camino óptico nula, ZPD). Esto implicaría que, de acuerdo a las propiedades de la transformada de Fourier, el espectro calculado habría de contar exclusivamente con términos reales, siendo nula cualquier componente imaginaria salvo aquellas correspondientes al ruido.

Sin embargo, el interferograma adquirido en la práctica dista en cierta medida de esta descripción idealizada incluso cuando el recorrido a ambos lados del ZPD es el mismo y el interferograma es nominalmente simétrico. La razón es que la señal interferencia es muestreada a lo largo de una secuencia discreta de puntos equivalentes a diferencias de camino óptico, pero este muestreo no es perfecto, en el sentido de mantener la simetría par entre las muestras obtenidas, dado que el punto de ZPD no suele coincidir con un punto del muestreo o estar exactamente situado entre dos, sino caer a una pequeña distancia x_s , lo que nos lleva a una primera fuente de asimetría. A este efecto se pueden superponer otras no idealidades como fenómenos de dispersión en los separadores de haz (normalmente de carácter no lineal), derivas térmicas (fruto de la electrónica de proximidad o de radiación espúrea) o alteraciones en el escenario de medida, como discutiremos en el capítulo 9.

Todo ello se traduce en un componente impar (véase la figura 4.9 donde se muestra un ejemplo de interferograma experimental), que origina la aparición de componentes imaginarias al trasladarnos al dominio espectral, incluso aunque previamente hayamos forzado que ambas ramas del interferograma contengan el mismo número de puntos y hayamos subsanado las posibles derivas.

Es conveniente exponer este efecto como la aparición de un término de fase $\phi(\nu)$ (para una mayor claridad seguiremos empleando la versión continua de la transformada de Fourier):

$$\mathcal{L}_c(\nu) = \mathcal{L}(\nu) \cdot e^{j\phi(\nu)} \quad (4.17)$$

De esta forma lo anterior no presentaría inconveniente alguno si nos restringiéramos a tomar el módulo del espectro complejo $|\mathcal{L}_c(\nu)|$, lo cual anularía cualquier influencia de la fase. Sin embargo, hay una manera mejor de afrontar el problema que consiste en sacar partido al hecho de que la señal interferométrica es par, y por tanto real en el dominio de la frecuencia, utilizándolo como criterio para distinguirla del ruido y reducir la potencia de éste.

Si consideramos un modelo de ruido aditivo, que es el que habitualmente domina el comportamiento de los detectores IR, esto es, $\mathcal{L}(\nu) = \mathcal{L}_0(\nu) + \eta(\nu)$, donde $\mathcal{L}_0(\nu)$ representa el espectro ideal libre de ruido y términos de fase, obtenemos:

$$\mathcal{L}_c(\nu) = \mathcal{L}_0(\nu) \cdot e^{j\phi(\nu)} + \eta(\nu) \cdot e^{j\phi(\nu)} \quad (4.18)$$

El término de fase afecta así tanto al espectro medido como al ruido, con la salvedad de que $\mathcal{L}_0(\nu)$ es una señal real mientras que el ruido podemos considerar que se distribuye uniformemente entre las componentes par e impar del interferograma, partes real y compleja respectivamente en el dominio espectral $\eta(\nu) = \eta_{real}(\nu) + j\eta_{imag}(\nu)$, lo que implica

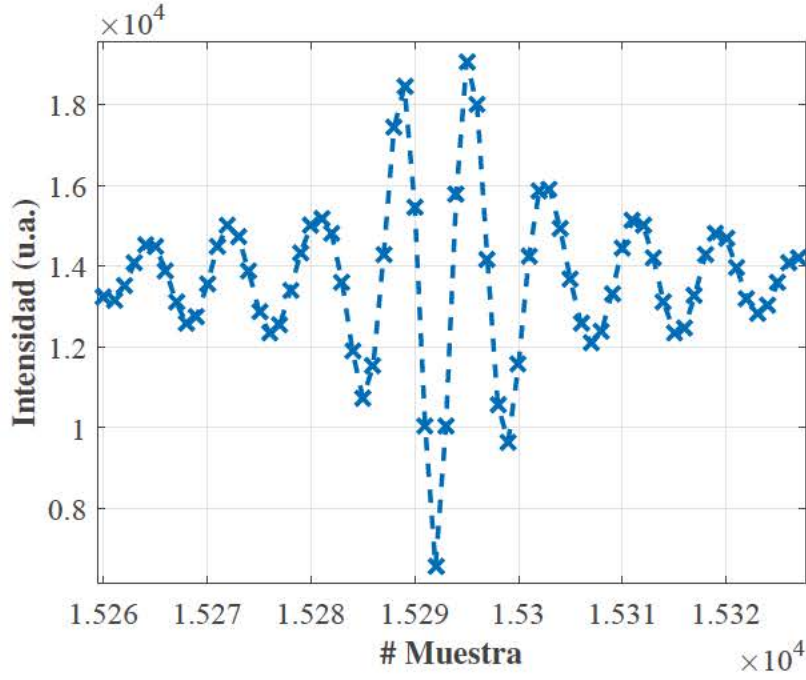


Figura 4.9: Ejemplo de interferograma experimental en el que se indican los puntos de muestreo, responsables de la clara asimetría que presenta.

que su potencia quede igualmente distribuida $\sigma_\eta^2 = \sigma_{\eta,real}^2 + \sigma_{\eta,imag}^2$. Por tanto, si fuéramos capaces de trasladar toda la energía del espectro medido a la componente real, sólo nos afectaría la contribución de la parte real del ruido ya que la componente imaginaria resultaría anulada, lo que supondría un descenso de la potencia de ruido en un factor $\sqrt{2}$ en condiciones de equidistribución.

Extraer la energía de la componente imaginaria supone compensar el término de fase $\phi(\nu)$. En general podemos modelizarlo por la suma de dos términos como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\phi(\nu) = j(\nu\delta_s + \phi_{nl}(\nu)) \quad (4.19)$$

Es decir, entendemos el error de muestreo como una operación de traslación x_s que, de acuerdo con las propiedades de la transformada de Fourier produce una fase lineal $\nu\delta_s$ (donde $\delta_s = 2\pi x_s$), a la que se añaden efectos no lineales que pueden aparecer, por ejemplo, si hay efectos dispersivos en el instrumento (de modo que se produzca una diferencia de camino x diferente para diferentes longitudes de onda [97], y que podría provocar que el ZPD estuviera en posiciones distintas para cada una de ellas).

La estrategia a seguir consiste en estimar $\phi(\nu)$ a partir de una versión reducida del interferograma original, quedándonos con un entorno pequeño de puntos alrededor de la posición de ZPD. Con el interferograma reducido se obtiene una estimación de la fase de baja resolución (filtrada paso bajo) que denominaremos $\phi_{PB}(\nu_{PB})$, donde ν_{PB} presenta un espaciado de mayor longitud con respecto al muestreo original, referido aquí como Δr .

Ese es el motivo por el cual los interferómetros de una única rama (*Single Sided In-*

terferometer) adquieren un pequeño número de muestras (centenas de puntos) en la rama nominalmente carente de recorrido. La estimación del término de fase asociado a los errores de muestreo en el interferograma y su posterior eliminación del espectro final puede llevarse a cabo en ambos dominios (tanto en el espectral como en el propio interferograma). Como veremos a continuación, en función del dominio en que nos encontremos emplearemos el método de Mertz, en el ámbito espectral, o el método de Forman, en el ámbito del interferograma, siendo éste último más eficiente en términos de computación.

Para ilustrar la aplicación de dichos métodos nos valdremos de un interferograma simulado a partir de la expresión 4.9, que modela la interferencia en un interferómetro de Michelson, y que se representa en la figura 4.10. Corresponde a la radiancia de un cuerpo negro a una temperatura de 350°C, en el intervalo espectral entre 1800 y 3000 cm^{-1} , muestreado de forma asimétrica con un periodo $T_s = \frac{1}{\nu_s} = \lambda_{HeNe} = 632,8 nm$ y una longitud suficiente como para alcanzar una resolución espectral de 1 cm^{-1} , al que se le ha añadido un pequeño nivel de ruido de varianza $\sigma_\eta = 1$ (en unidades arbitrarias) de tipo AWGN (*Additive White Gaussian Noise*).

En la figura 4.11 se han representado las componentes real e imaginaria del espectro obtenido al realizar la transformada de Fourier sobre dicho interferograma, $Re(\mathcal{F}\{I(x)\})$ y $Im(\mathcal{F}\{I(x)\})$, respectivamente. Se aprecia la presencia de una importante componente imaginaria fruto de la fase inducida a pesar de que la asimetría del muestreo es pequeña y escasamente apreciable en el interferograma. Igualmente se comprueba como, pese a utilizar una potencia de ruido σ_η relativamente baja, prácticamente inapreciable en la señal interferométrica, su impacto en el dominio espectral es amplificado notablemente. Esto se debe al carácter aleatorio del ruido introducido, esto es, su baja correlación entre muestras.

4.2.4.1. Método de Mertz

En este método tanto la estimación de $\phi(\nu)$ como su compensación se llevan a cabo en el dominio espectral. Seleccionaremos un pequeño intervalo del interferograma de partida en torno al máximo, esto es en las muestras con mayores niveles de relación señal a ruido, de forma que tras aplicar la transformada de Fourier se obtenga un espectro equivalente de baja resolución y con el mínimo impacto tanto de ruido como de posibles artefactos en la medida. La fase de dicho espectro, $\phi_{PB}(\nu_{PB})$, se utilizará para estimar y corregir la fase en el dominio espectral, previa interpolación, sobre el espectro de alta resolución, corrigiendo así los efectos de las asimetrías debidas al muestreo y otros efectos no lineales. Es decir:

$$\hat{\phi}(\nu) \approx \phi_{PB}(\nu) \quad (4.20)$$

En nuestro ejemplo hemos utilizado un intervalo de 512 muestras en torno a la posición del ZPD, con el que se obtiene la estimación de fase que se muestra en la figura 4.12, y que puede verse como reproduce el comportamiento de la fase original en la región espectral con suficiente SNR, pero con mucho menos ruido; mientras que fuera de esta región el término de fase fluctúa de forma indeterminada, puesto que la señal es nula y toda la contribución proviene del ruido introducido. Una vez estimada la fase, el espectro corregido es simplemente $\mathcal{L}_c(\nu)e^{-j\hat{\phi}(\nu)}$. Este espectro sería puramente real si no fuera

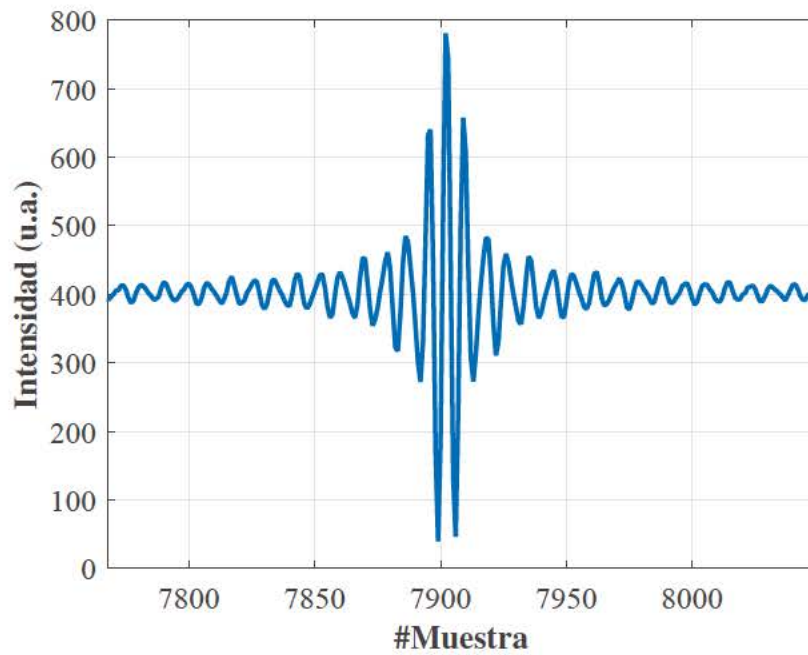


Figura 4.10: Ejemplo de interferograma teórico correspondiente a la radiancia que emitiría un cuerpo negro a la temperatura de 350°C.

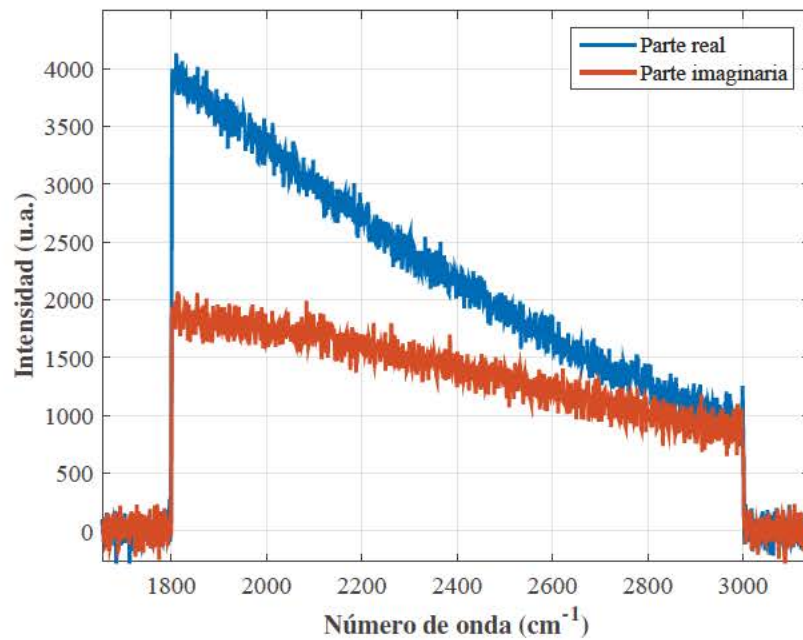


Figura 4.11: Representación de las componentes real e imaginaria del espectro correspondiente al interferograma simulado en la figura 4.10.

por el ruido, que está distribuido por igual en las partes real e imaginaria. Al quedarnos finalmente con la parte real, conseguimos una reducción de éste. Con más detalle, si representamos ambas componentes real e imaginaria, $Re(\mathcal{L}_c(\nu)e^{-j\hat{\phi}(\nu)})$ e $Im(\mathcal{L}_c(\nu)e^{-j\hat{\phi}(\nu)})$, podemos comprobar como la totalidad de la energía de la señal se concentra en la parte real (ver figura 4.13), mientras que la distribución de ruido permanece repartida en ambos dominios, obteniendo la mejora de la SNR buscada. La siguiente expresión 4.21 describe de forma analítica el proceso de corrección de fase mediante el método de Mertz:

$$Re[\mathcal{L}_c(\nu)e^{-j\hat{\phi}(\nu)}] = Re[\mathcal{L}_0(\nu)e^{j\phi(\nu)}e^{-j\hat{\phi}(\nu)} + \eta(\nu)e^{j\phi(\nu)}e^{-j\hat{\phi}(\nu)}] \approx \mathcal{L}_0(\nu) + \eta_{real}(\nu) \quad (4.21)$$

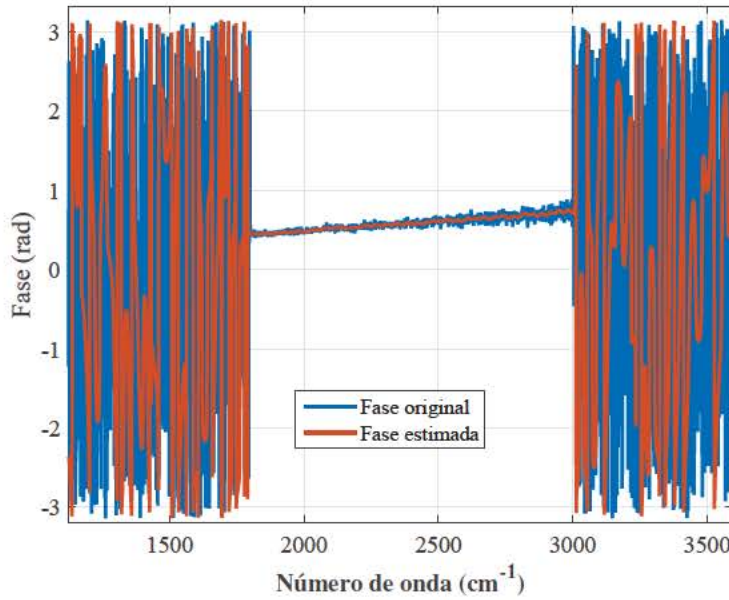


Figura 4.12: Comparación entre las fases de alta y baja resolución espectral, donde se aprecia que los efectos simulados pueden aproximarse adecuadamente por términos de baja frecuencia.

4.2.4.2. Método de Forman

En el ámbito del interferograma puede llevarse a cabo la misma corrección que en el dominio espectral. El término de fase de baja resolución ($\phi_{PB}(\nu_{PB})$) también se puede estimar a partir de un pequeño interferograma tomado en torno al máximo, exactamente igual que en el caso anterior. La única diferencia radica entonces en la forma de compensar dicha fase, dado que para poder realizar la corrección en el propio interferograma es necesario transformar el término de fase conjugado ($e^{-j\hat{\phi}(\nu)}$) a partir de la transformada inversa de Fourier y, dada la relación entre ambos dominios, construir un filtro discreto que pueda aplicarse mediante la operación de convolución sobre el interferograma original.

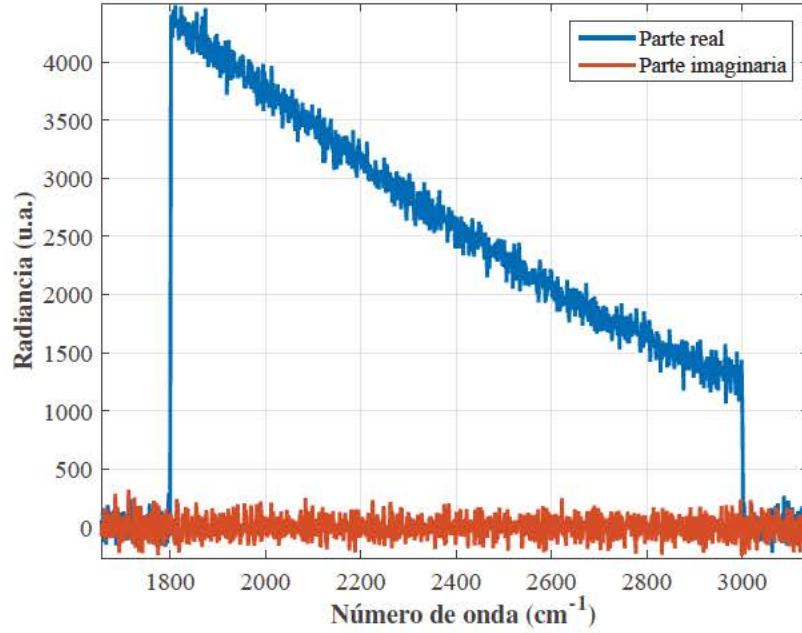


Figura 4.13: Corrección de fase mediante el método de Mertz sobre el interferograma de la figura 4.10. La señal se distribuye únicamente en el dominio real, mientras que la componente imaginaria del ruido es eliminada de ésta, mejorándose la relación señal a ruido.

Este filtro discreto se denota $PF(x)$ y se obtiene de acuerdo a la expresión 4.22:

$$PF(x) = \mathcal{F}^{-1}\{e^{-j\hat{\phi}(\nu)}\} \quad (4.22)$$

Posteriormente se emplea PF para ser convolucionado con el interferograma de partida $I_c(x)$, lo que resulta en un interferograma con simetría par, incluyendo la componente par del ruido:

$$I_0(x) = I_c(x) * PF(x) = I_0(x) * PF(x) + \eta_{par}(x) \quad (4.23)$$

En nuestro ejemplo no existen diferencias apreciables en los resultados obtenidos por ambos métodos, siendo el método de Forman el que menos operaciones realiza (ya que evita realizar las operaciones de interpolación de forma explícita), por lo que será el más indicado en la práctica. Sí se muestra en la figura 4.14 la función de corrección de fase $PF(x)$ obtenida para el interferograma simulado del ejemplo.

4.3. Imagen hiperespectral en el infrarrojo medio

Todos los procesos descritos en el apartado anterior son propios de la espectroscopia FTIR, independientemente de que se forme imagen o no.

El hecho de añadir la dimensión espacial a la capacidad de análisis espectral implica algunos efectos adicionales de los que hay que dar cuenta, y requiere una explicación, aunque sea breve, del concepto de imagen hiperespectral.

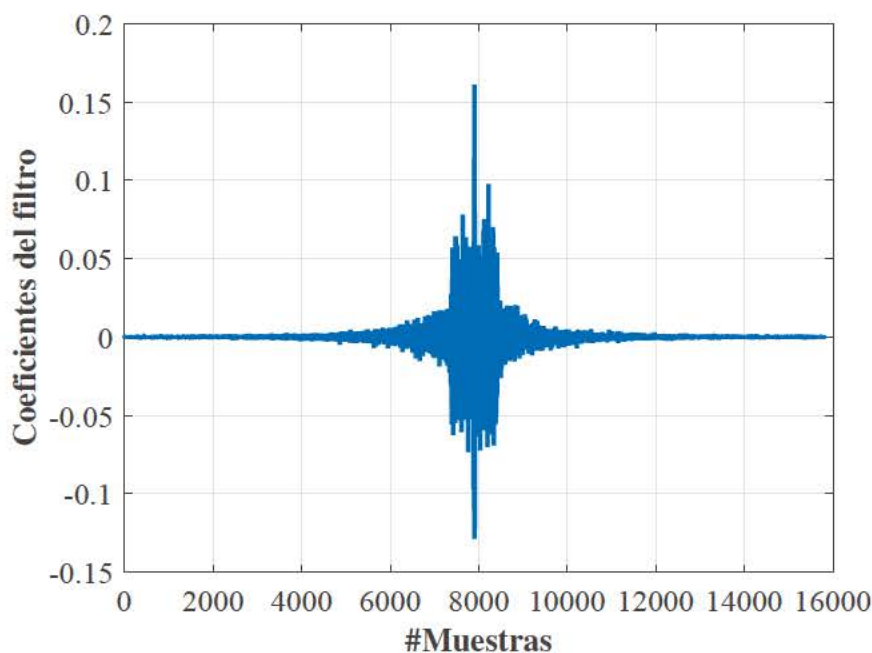


Figura 4.14: Función de corrección de fase $PF(x)$ obtenida tras la aplicación del método de Forman.

4.3.1. El concepto de imagen hiperespectral

Tradicionalmente, los equipos denominados como *espectrómetros* o *espectrorradiómetros* han estado claramente diferenciados de aquellos conocidos como *de imagen*, esto es, cámaras. Ambas tecnologías han seguido líneas de desarrollo independientes pese a que han sido empleadas en un gran número de aplicaciones íntimamente interrelacionadas. El surgimiento de la tecnología de *imagen hiperespectral* se debe al objetivo de aunar la información obtenida por ambos dispositivos (espectral y de imagen), creando sistemas dotados de resolución en ambos dominios: espectral y espacial, tal y como se muestra en la figura 4.15.

La información registrada por los sistemas de imagen hiperespectral es comúnmente almacenada en estructuras de datos denominadas *datacubos* o pilas de imágenes. En la figura 4.16 podemos ver una ilustración gráfica de la naturaleza 3-D de este tipo de estructuras. Para cada píxel de la imagen se obtiene a su vez su correspondiente espectro, que puede contener cientos o miles de bandas espectrales (a diferencia de los dispositivos *multiespectrales*, que sólo cuentan con un número mucho más limitado de bandas, en general inferior a una decena).

En los últimos años, los sistemas de imagen con capacidad hiperespectral han proliferado en las regiones visible e infrarrojo cercano, basados fundamentalmente en tecnología de carácter difractivo. Sin embargo, en las regiones comprendidas por el infrarrojo medio (de 3 a 5 μm) y lejano (de 8 a 12 μm) la implementación de este tipo de tecnología no resulta tan sencilla y eficiente, por lo que en dichas bandas los dispositivos de imagen hiperespectral son poco comunes y han adquirido una mayor complejidad.

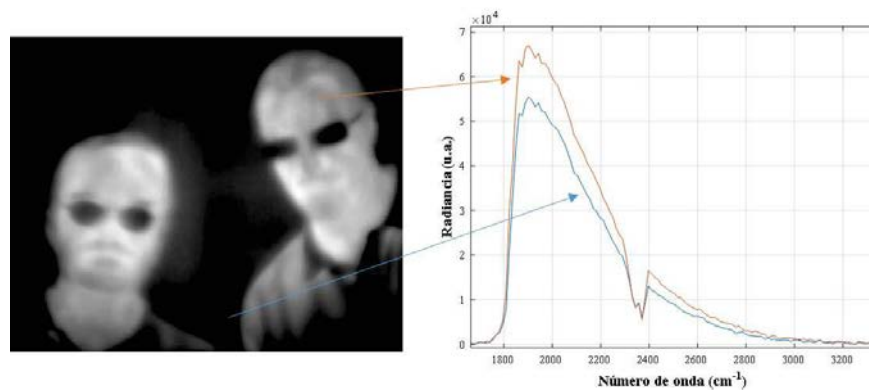


Figura 4.15: Ejemplo de imagen hiperespectral en el infrarrojo medio, adquirida con el sistema Telops FIRST-MW, donde se muestra la información espectral contenida en cada píxel de la imagen.

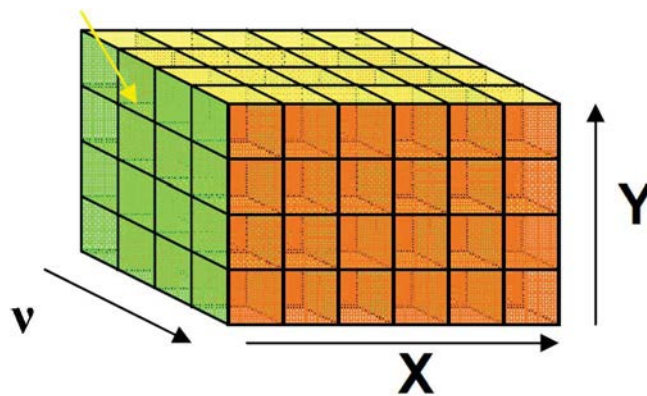


Figura 4.16: Representación gráfica de un datacubo de imagen hiperespectral, donde se combinan ambas resoluciones espacial (x, y) y espectral (ν).

4.3.2. Sistema Telops FIRST-MW

Los espectrómetros de imagen basados en tecnología FTIR conforman el estado de arte actual en cuanto a imagen hiperespectral se refiere, tratándose de dispositivos de última generación cuyo desarrollo se inició a principios de la década pasada. Se caracterizan por tener una implementación análoga a los dispositivos FTIR tradicionales, con la salvedad de que el detector infrarrojo es sustituido por un FPA o array de detectores, dotando así al sistema de resolución espacial.

En nuestro caso, el Laboratorio de Sensores, Teledetección e Imagen Infrarroja de la Universidad Carlos III de Madrid (LIR-UC3M) dispone de un espectrorradiómetro de imagen en el infrarrojo medio extendido, el equipo FIRST-MW (*Field-portable Imaging Radiometer Technology*) de la compañía canadiense Telops Inc., mostrado en la figura 4.17. Cabe resaltar su elevado coste económico y exclusividad, puesto que a día de hoy sólo se encuentra otra unidad más en toda Europa.

Debido a la región espectral en la que opera, podemos encontrar aplicaciones para este tipo de equipos de carácter tanto civil (exploración de compuestos, búsqueda y rescate, estudios geológicos, teledetección de gases contaminantes, etc.) como otras de ámbito estrictamente militar (detección de minas y munición sin explotar, identificación de armas químicas, análisis espectral de pinturas para camuflaje o compuestos gaseosos provenientes de combustiones).



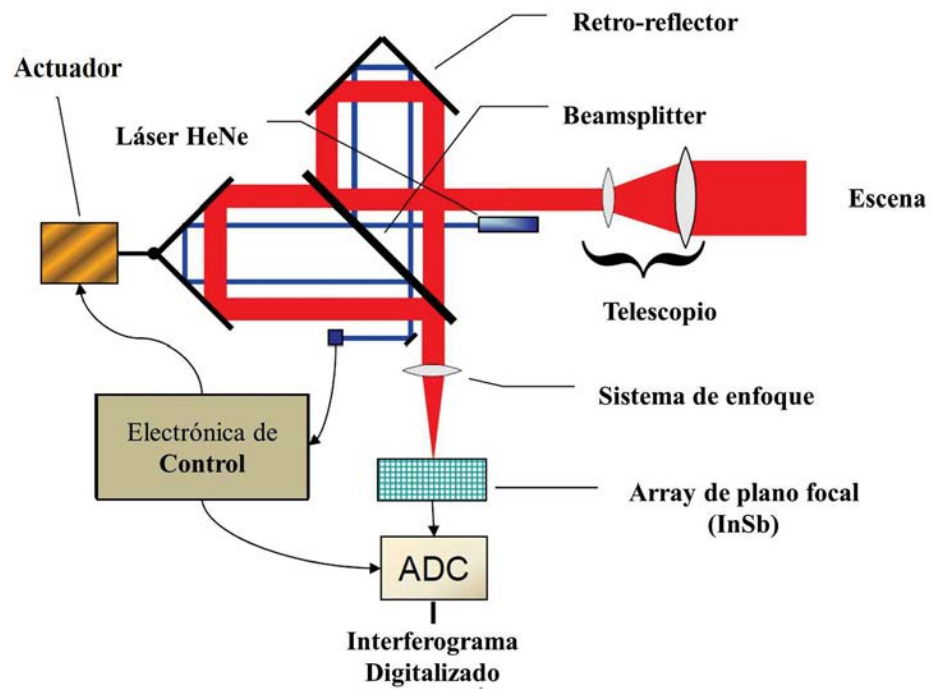
Figura 4.17: Equipo de imagen hiperespectral en el infrarrojo medio FIRST-MW de Telops.

La resolución espectral se obtiene a partir de un interferómetro de Michelson, compuesto por un divisor de haz o *beamsplitter* y dos espejos retro-reflectores de tipo *cubic-corner* dispuestos según el esquema mostrado en la figura 4.18a. Para la discretización del interferograma (figura 4.18b), emplea como período de muestreo la longitud de onda de un láser de HeNe ($\lambda = 632,816 \text{ nm}$) que proporciona una gran estabilidad y precisión para conseguir una frecuencia de muestreo constante a lo largo de toda la adquisición, y permite alcanzar una longitud de onda mínima de muestreo de aproximadamente $1.27 \mu\text{m}$ siguiendo el criterio de Nyquist para señales en banda base.

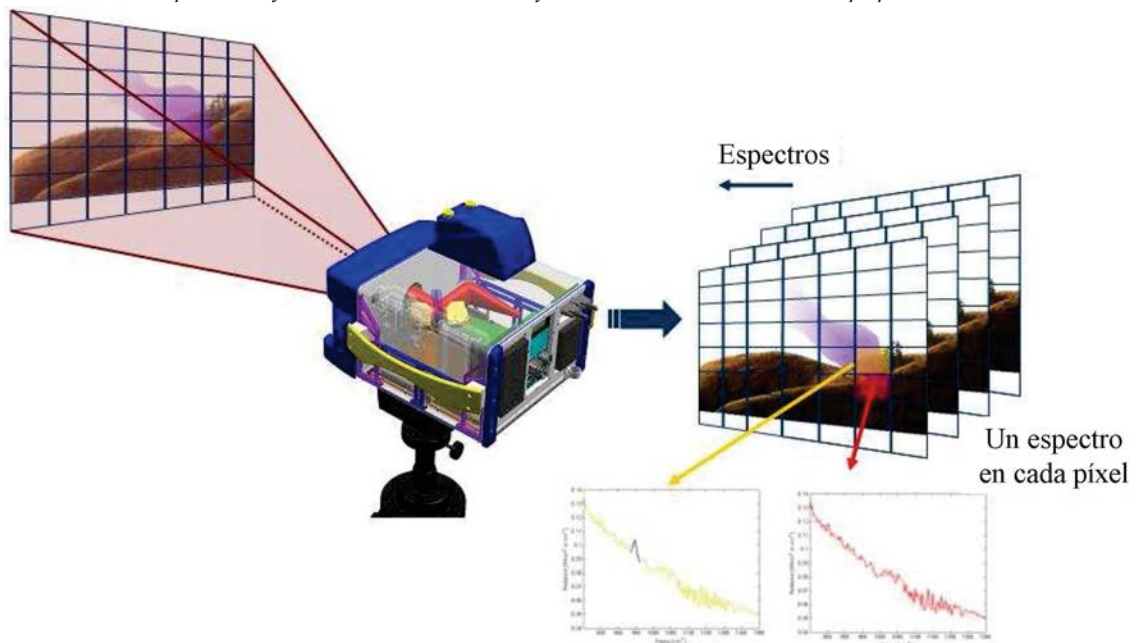
Como elemento sensor se utiliza una matriz de detectores de 320×256 píxeles de antimonio de indio (InSb). Este tipo de tecnología requiere de refrigeración para alcanzar la detectividad necesaria, para lo que se emplea un refrigerador Stirling encargado de fijar una temperatura en el sustrato de 81 K.

La resolución espectral se puede modificar para cada adquisición en el intervalo comprendido entre 128 cm^{-1} y $0,25 \text{ cm}^{-1}$, lo que selecciona el número de puntos del interferograma. Para resoluciones de entre 128 cm^{-1} y 1 cm^{-1} los interferogramas adquiridos son simétricos, y para resoluciones correspondientes a valores menores sólo crece una de las ramas del interferograma, como es habitual en los dispositivos FTIR.

En la tabla 4.1 se resumen las especificaciones técnicas del equipo FIRST-MW.



(a) Esquema de funcionamiento del interferómetro de Michelson del equipo FIRST-MW.



(b) Ilustración del concepto de imagen hiperespectral, donde cada píxel se corresponde con un espectro de la escena observada.

Figura 4.18: Resumen del mecanismo de selección espectral del equipo de imagen hiperespectral FIRST-MW. Figuras adaptadas de la información proporcionada por el fabricante Telops Inc.

Especificaciones técnicas de FIRST-MW	
Detector	InSb
Región Espectral	1.5 - 5 μm
Array	320x256 píxeles
Resolución Espectral	128 - 0.25 cm^{-1}
Píxel Pitch	30 μm
Field of View	0.35 mrad
Protocolo Datos	Camera Link
Protocolo Control	Ethernet
Potencia consumida	250 W
Voltaje alimentación	28 VDC
Dimensiones	0.45 x 0.44 x 0.25
Peso	30 Kg

Tabla 4.1: Tabla resumen de las especificaciones técnicas del FIRST-MW.

4.3.3. Corrección del eje óptico

Las técnicas de procesamiento descritas en la sección anterior son de común aplicación en la espectroscopia FTIR tradicional. Sin embargo, la particularidad de formar imagen a partir de un array de plano focal tiene como consecuencia que el espectro asociado a cada píxel posea un eje de números de onda ligeramente diferente debido a la pequeña diferencia de camino asociada a la desviación respecto del eje óptico. En concreto, el eje de números de onda debe re-escalarsse de forma proporcional a la distancia a la que el píxel se encuentre del eje óptico. El factor corrector de este efecto para cada píxel (i, j) se muestra en la expresión 4.24, de acuerdo al desarrollo expuesto en [36].

$$k_{i,j} = \frac{\nu_{HeNe}}{\nu_{i,j}} = \cos \sqrt{((i - i_0) \times \theta_W)^2 + ((j - j_0) \times \theta_H)^2} \quad (4.24)$$

donde:

- ν_{HeNe} es el eje de números de onda ideal, correspondiente a muestrear con un láser de HeNe.
- $\nu_{i,j}$ es el eje de números de onda que le corresponde al píxel (i, j) .
- (i_0, j_0) es el píxel en el que se encuentra el eje óptico del array, que podría no coincidir con el punto central de éste.
- θ_W y θ_H son los campos de visión instantáneos (iFOV) en los ejes horizontal y vertical, respectivamente.

De este modo, conociendo tanto los iFOVs en cada dirección como la posición del eje óptico en el array se podría corregir fácilmente este efecto. Sin embargo, estos parámetros son a veces difíciles de determinar con precisión, especialmente la posición del eje óptico, lo que en la práctica nos obliga a tratar de estimar el factor de corrección necesario de forma experimental. Esto puede conseguirse si conocemos la posición exacta de una o varias

líneas de absorción dentro del espectro (por ejemplo de H_2O) que nos sirvan de referencia. A partir de bases de datos como HITRAN-2012 [107] con los parámetros espectrales de un grán número de moléculas, podemos identificar dichas líneas para encontrar así el factor de corrección necesario.

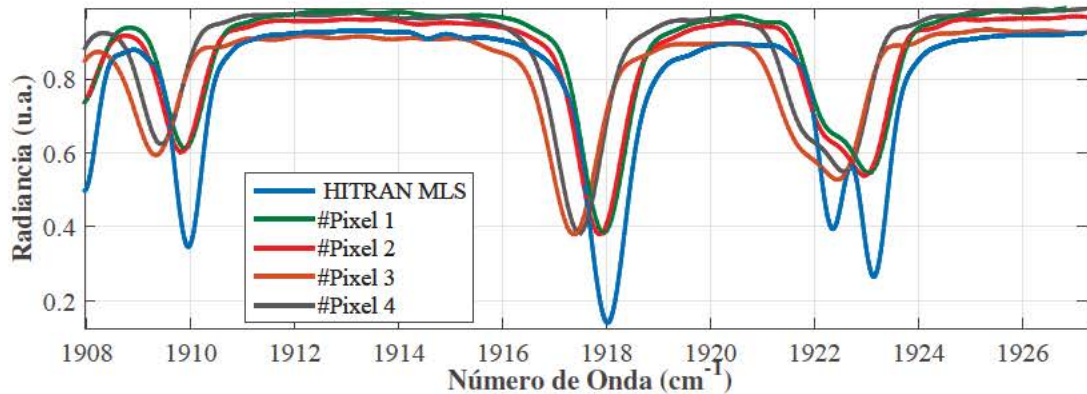


Figura 4.19: Comprobación de distintos desplazamientos en el eje de números de onda, tomando como referencia el modelo Mean Latitude Summer de HITRAN.

En la figura 4.19 se comprueba el desplazamiento en el eje de números de onda para distintos puntos del array, junto a un espectro sintético simulado a partir de la base de datos HITRAN. La región espectral es la de la línea de referencia seleccionada (H_2O en 1918 cm^{-1}) con la que se obtienen los factores de corrección para cada píxel en la figura 4.20, de donde es posible obtener de forma experimental la posición del eje óptico de nuestro instrumento.

4.4. Secuencia de procesado en FIRST-MW

Dado que nuestro equipo, el espectrómetro de imagen FIRST-MW, únicamente adquiere interferogramas sin ningún tipo de procesado adicional, es necesario aplicar todas las técnicas descritas en la sección anterior para obtener la información espectral con la mejor relación señal a ruido posible y con el menor número de distorsiones y artefactos. Se empleará el esquema de procesado espectral que se muestra en el diagrama de flujo de la figura 4.21, compuesto de las siguientes etapas:

1. **Corrección DC y derivas** (apartado 4.2.1). El objetivo de esta etapa es sustraer la componente continua en la medida de lo posible, además de corregir eventuales derivas en la línea base del interferograma. Con esto se reducen en gran medida posibles saltos bruscos en el interferograma al aplicar la etapa de simetrización.
2. **Simetrización** (apartado 4.2.1). Para resoluciones altas ($< 1\text{ cm}^{-1}$) los interferogramas dejan de ser simétricos, por lo que se hace necesario forzar dicha simetría antes de aplicar la transformada de Fourier.
3. **Apodización** (apartado 4.2.2). En este caso se ha seleccionado una ventana triangular debido a que su respuesta en frecuencia no tiene componentes negativas (figura

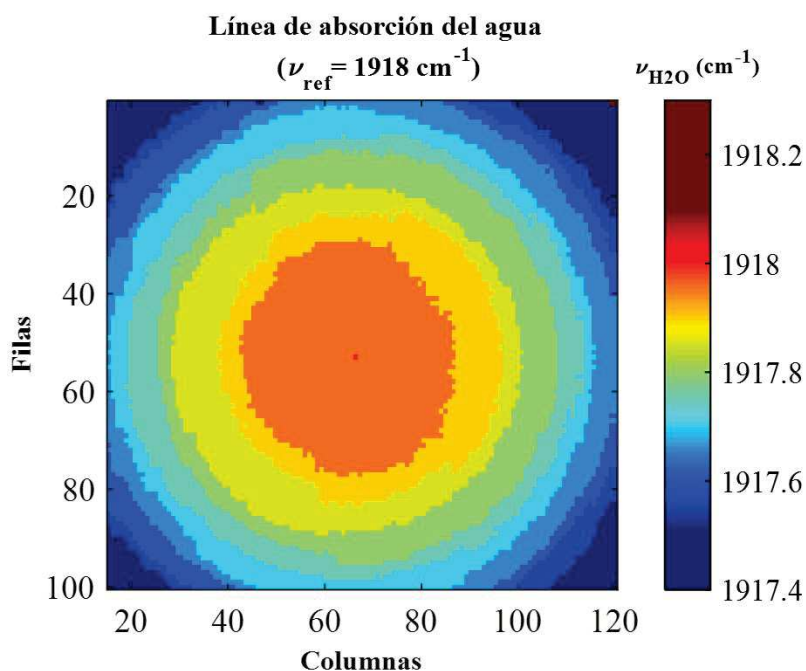


Figura 4.20: Representación de la posición de la línea de absorción seleccionada como referencia (1918 cm^{-1}) en cada píxel del array, previa a la corrección del eje óptico a partir de la ratio entre la posición de la línea de agua y la de referencia.

- 4.5). Gracias a ello se eliminan posibles oscilaciones mejorándose la relación señal a ruido a costa de empeorar ligeramente la resolución efectiva.
4. **Padding y FFT** (apartado 4.2.3). En esta etapa se añaden ceros al interferograma para mejorar la interpolación del espectro resultante y se realiza la transformada de Fourier a partir del algoritmo FFT (*Fast Fourier Transform*). Se ha seleccionado un factor de padding igual a 7, después de comprobar que para valores mayores no se obtienen mejoras sustanciales.
5. **Corrección de fase** (apartado 4.2.4). Esta corrección se realiza en el dominio del interferograma (método de Forman), partiendo de un mini-interferograma de 512 puntos centrado en la posición de ZPD.
6. **Corrección off-axis** (apartado 4.3.3). En último lugar, se corrige el eje de número de ondas para cada píxel en función de la posición (x, y) que ocupa en el array.

Con el fin de mostrar las mejoras producidas por el procesado espectral aquí implementado, la figura 4.22 presenta una comparación entre dos espectros obtenidos a partir de un mismo interferograma experimental, correspondiente al espectro de emisión de un cuerpo negro (a 350°C) tras recorrer 2 metros de atmósfera. El espectro en azul es el resultado de aplicar las técnicas propuestas según el diagrama de flujo 4.21; en contrapartida, el espectro representado en naranja ha sido generado a partir de una simple transformada de Fourier. Es fácil ver como el espectro procesado cuenta con una mejor relación señal a

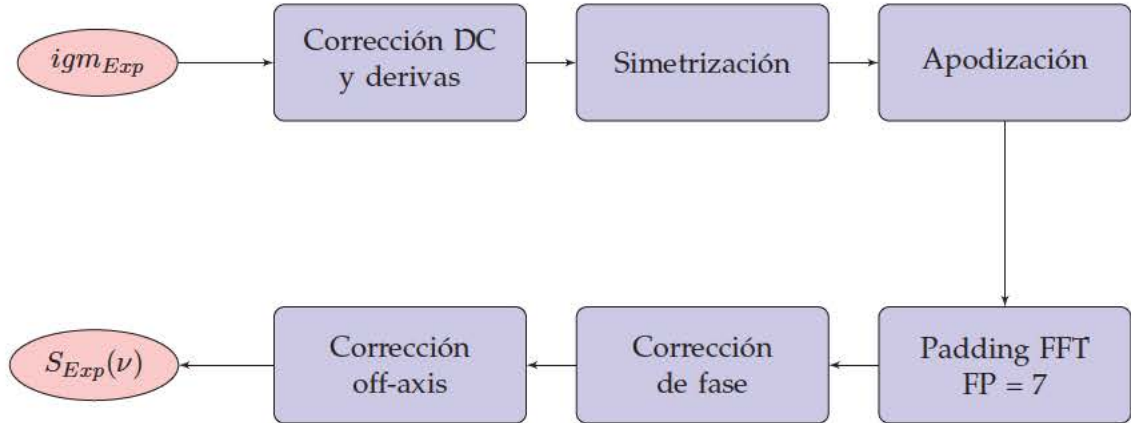


Figura 4.21: Diagrama de flujo con las etapas de procesamiento necesarias para obtener el espectro experimental $S_{Exp}(\nu)$ a partir del interferograma medido igm_{Exp} .

ruido, y reproduce de forma más adecuada y con mayor detalle la estructura espectral, a partir de un mayor número de puntos interpolados de forma óptima.

4.4.1. Calibración en unidades de radiancia

Para sacar el máximo partido de nuestro sistema de imagen hiperespectral es conveniente que podamos expresar sus medidas experimentales en términos de una magnitud física, es decir, que el instrumento esté calibrado. Al tratarse de un dispositivo que forma imagen, la magnitud natural es la radiancia, tal y como demostrábamos en el apartado 2.4.3.

Nuestro sistema de imagen hiperespectral se encarga de recoger la señal que proporciona el interferómetro de Michelson a través de un array de detectores, que transducen la interferencia óptica en una magnitud eléctrica para, posteriormente, digitalizarla. Y esta información sabemos que se relaciona con la distribución espectral a través de su transformada de Fourier. La etapa más crítica en ese proceso resulta ser precisamente la medida de la señal óptica, que debe adecuarse al rango dinámico seleccionado, especialmente en zonas límites como el ZPD, de forma que se garantice la operación en torno a la zona lineal del detector, minimizándose las no linealidades que dan pie a distorsiones (ver figura 4.23).

Sin embargo, y salvo en excepciones que más adelante tendremos la oportunidad de discutir (ver sección 8.2.2), en la práctica resulta mucho más cómodo extender la modelización del sistema de medida hasta abarcar la síntesis espectral, y no delimitar los parámetros de calibración a este proceso de transducción. De esta forma, la calibración del instrumento puede llevarse a cabo en el dominio espectral, sin que a priori sea necesario describir este proceso en términos de la señal interferométrica.

Al igual que en las cámaras IR de banda integrada, para llevar a cabo la calibración radiométrica se asume que la señal obtenida tras el procesamiento espectral ($S^{exp}(\nu)$) sigue una relación lineal con la radiancia detectada ($\mathcal{L}_{det}(\nu)$), esto es, para cada píxel del array

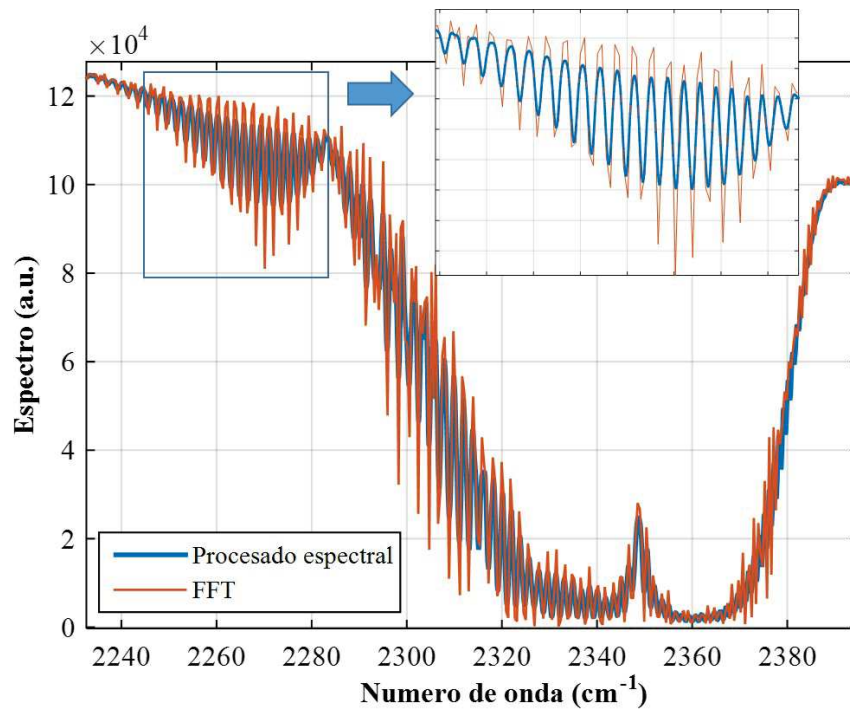


Figura 4.22: Espectro experimental obtenido tras las etapas de procesado propuestas, en comparación con el obtenido tras únicamente aplicar la operación de transformada de Fourier.

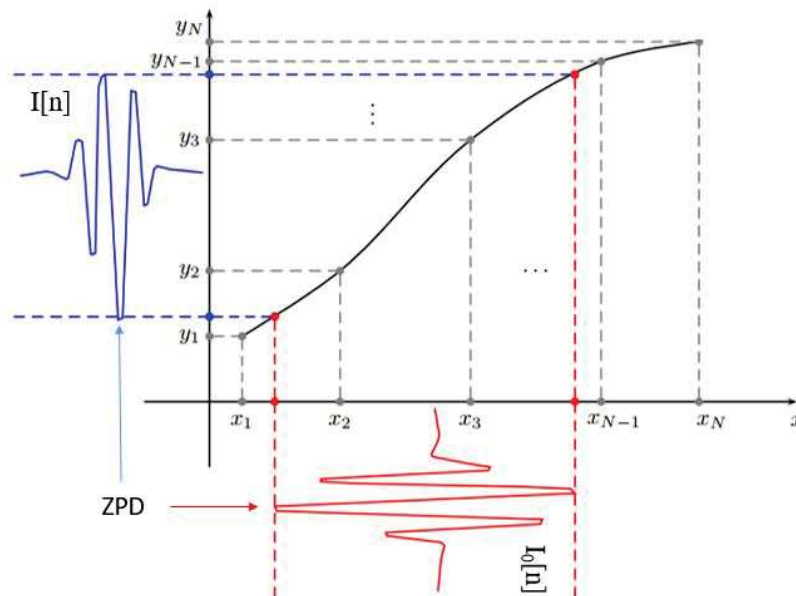


Figura 4.23: Importancia de la selección de un régimen de operación lineal en la medida de la señal interferométrica. Figura adaptada de la representación mostrada en [125].

y para cada número de onda tendríamos:

$$S^{exp}(\nu) = G(\nu) \cdot (\mathcal{L}_{det}(\nu) + \mathcal{L}_{off}(\nu)) \quad (4.25)$$

Donde $G(\nu)$ es la respuesta espectral del sistema completo, que recoge el efecto de términos como el coeficiente de transmisión del *beamsplitter*, y del resto de elementos ópticos, junto a la responsividad del detector. El término $\mathcal{L}_{off}(\nu)$ representa la radiación parásita ajena a la medida, como la proveniente del interior del dispositivo o de elementos ópticos externos, además de otros términos de naturaleza continua introducidos por la electrónica de adquisición.

El proceso de calibración se resume en estimar para cada píxel $G(\nu)$ y $\mathcal{L}_{off}(\nu)$, para lo que bastaría con emplear dos medidas ($S_c(\nu)$ y $S_h(\nu)$) cuya distribución espectral de radiancia sea conocida, como las que proporciona un cuerpo negro a dos temperaturas diferentes. Siendo T_c y T_h dichas temperaturas, la radiancia en el detector de ambas medidas no es más que la ley de Planck ponderada por la emisividad, resultando en:

$$G(\nu) = \frac{S_h(\nu) - S_c(\nu)}{\varepsilon(\nu) \cdot \mathcal{L}_{CN}(T_h, \nu) - \varepsilon(\nu) \cdot \mathcal{L}_{CN}(T_c, \nu)} \quad (4.26)$$

$$\mathcal{L}_{off}(\nu) = \frac{S_h(\nu)}{G(\nu)} - \varepsilon(\nu) \cdot \mathcal{L}_{CN}(T_h, \nu) = \frac{S_c(\nu)}{G(\nu)} - \varepsilon(\nu) \cdot \mathcal{L}_{CN}(T_c, \nu) \quad (4.27)$$

donde, conocidas $\varepsilon_c(\nu)$, $\varepsilon_h(\nu)$, T_h y T_c , se obtienen $G(\nu)$ y $\mathcal{L}_{off}(\nu)$ sin más que sustituir dichos valores en las expresiones anteriores para cada número de onda.

Hay que señalar que en la ecuación 4.25 se han ignorado los efectos de la forma de línea instrumental (ILS). Para tenerla en cuenta, habría que escribir:

$$S^{exp}(\nu) = G(\nu) \cdot \left[(\mathcal{L}_{det}(\nu) + \mathcal{L}_{off}(\nu)) * \text{ILS}(\nu) \right] \quad (4.28)$$

Sin embargo, teniendo en cuenta que los espectros usados para la calibración presentarán una dependencia suave con ν , el efecto de la ILS sobre el calibrado es irrelevante y puede ser ignorado.

En la práctica, pueden estimarse la ganancia $G(\nu)$ y el término de *offset* $\mathcal{L}_{off}(\nu)$ mediante espectros de baja resolución espectral, sin más que interpolar después dichos resultados cuando se apliquen sobre medidas de mayor resolución. Esto tiene como ventaja el que sólo se empleen aquellas muestras del interferograma con mayor relación señal a ruido, traduciéndose en espectros de mayor calidad. Además, si se aplica la corrección de fase a los interferogramas, los espectros obtenidos quedarán libres de componente imaginaria, y con menor ruido. Si este no fuera el caso, habría que considerar que los parámetros de calibración, $G(\nu)$ y $\mathcal{L}_{off}(\nu)$, pueden tomar valores complejos, como se describe en [23]. Esta situación no presenta mayores inconvenientes, con la salvedad de que existan discrepancias, en ocasiones sutiles, como cambios de fase, entre las medidas de referencia y las que se pretende calibrar, que habrán de valorarse en cada caso.

Por otra parte, técnicas habituales en el procesado de imagen IR, como la corrección de no uniformidades en el array de detectores (o NUC) [132] también pueden ser empleadas para aligerar las tareas de calibración, garantizando así que todos los elementos responden de igual forma ante un mismo nivel de radiancia en la escena observada.

Cuantificación de gases mediante imagen hiperspectral

El reciente desarrollo y disponibilidad comercial de espectrómetros de imagen basados en transformada de Fourier (IFTS) ha abierto las puertas a un nuevo abanico de posibilidades en el campo de la teledetección, y, muy especialmente, en su aplicación a los gases. Mientras que el uso de técnicas de espectrometría por transformada de Fourier para la medida de efluentes gaseosos de chimeneas u otras fuentes industriales tiene ya una larga historia [92, 44, 137], la resolución espacial recientemente añadida proporciona una nueva dimensión a estas técnicas, convirtiéndolas en estrategias mucho más potentes y prometedoras [35, 15]. Así, no sólo es posible la obtención de mapas de concentración y temperatura, sino que además, dado que el pequeño campo de visión asignado a cada píxel (iFOV) minimiza el promediado espacial entre regiones inhomogéneas, es posible emplear modelos más sencillos en el análisis de datos, repercutiendo en una cuantificación más precisa. El estudio de la evolución temporal de este tipo de imágenes hace posible incluso su seguimiento (*tracking*) y la estimación de magnitudes más complejas como el flujo de masa o volumen que tiene lugar [39].

El problema que nos planteamos aquí es estimar la emisividad (o, equivalentemente, la densidad de columna) de un determinado volumen de gas cuando éste se encuentra a una temperatura también desconocida, con las implicaciones de acoplamiento entre ambas variables que ello supone. Esto nos lleva a adentrarnos en el problema de la separación entre emisividad y temperatura ya enunciado en la sección 2.5.4, en la que se resumían algunas de las aproximaciones propuestas por otros autores. Sin embargo, el hecho es que que ambas variables no son estrictamente separables, siendo imposible obtener una sin estimar la otra, dado que la temperatura tiene un doble efecto en la radiación emitida: por un lado, a través de la actuación de la ley de Planck, y por otro, alterando la firma espectral, distorsionando la distribución de la absorptividad.

En la modalidad de absorción (también descrita en el capítulo 2) el efecto de la temperatura es menor, ya que idealmente sólo se da el segundo de los efectos mencionados, puesto que la propia emisión del gas sería despreciada frente al fondo. La menor sensibilidad a la temperatura puede ser una ventaja si lo que importa es sólo medir la concentración (o densidad de columna), pero complica aún más el problema cuando queremos recuperar el valor de T . La necesidad de procesar suficiente **resolución espectral** es uno de los motivos principales por los que se decide el uso de un sistema de imagen hiperspectral, como el descrito en el capítulo 4, para afrontar el problema de la recuperación

de densidad de columna y temperatura de compuestos gaseosos a través de espectros experimentales. Esto requiere de una modelización precisa de tanto el escenario en cuestión como del instrumento de medida, para lo cual se ha desarrollado un modelo radiométrico *línea a línea* o LBLRTM (*Line-By-Line Radiative Transfer Model*), que se describe a lo largo de la sección 5.3, y que explicita la relación entre la radiancia observada y los parámetros que componen la nube de gases.

En trabajos de otros autores, los sistemas IFTS ya han sido empleados para la teledetección de los gases emitidos por chimeneas industriales [11, 35], en concreto en plantas de generación de energía eléctrica, con resultados satisfactorios; incluso han llegado a emplearse para la observación de fuentes móviles (como el caso de barcos [109], en tareas de inspección aérea [31] o en la medida de motores de aeronaves [11]). Dentro de este último campo, la teledetección de las emisiones provenientes de vehículos con motor de combustión ha estado tradicionalmente limitada al uso de sensores puntuales, sin capacidad de proveer imagen, y, en cualquier caso, sólo se han podido llegar a obtener ratios entre distintas especies en lugar de valores absolutos [13]. Al final de este capítulo también exploraremos la capacidad que los sistemas IFTS poseen para proporcionar imágenes cuantitativas de temperatura y densidad de columna en este tipo de aplicaciones.

En concreto, hemos estudiado dos casos bien diferenciados: una fuga controlada de CO_2 , que ha de servir para validar la metodología de medida propuesta; y, por otro lado, los gases provenientes de la combustión del motor de un automóvil. La metodología se basa en el ajuste de los espectros experimentales con los correspondientes espectros teóricos generados a partir de un modelo de transferencia radiativa línea a línea (LBLRTM), que considera los fenómenos de absorción y emisión, la función de respuesta del instrumento (ILS) y la absorción atmosférica.

Los valores de temperatura y concentración se obtendrán de forma independiente para cada píxel a partir de un algoritmo de ajuste iterativo. El objetivo es encontrar una simulación teórica que reproduzca de forma óptima la medida experimental (S_{exp}), sea esta transmitancia, radiancia, etc. Esta simulación ha de converger hacia dicha solución en el menor número de iteraciones posibles, establecida dicha convergencia en términos de minimización de la suma del error cuadrático entre la magnitud medida y la generada por el modelo. El resultado final es la obtención de mapas cuantitativos de densidad de columna y temperatura, que reproducen de forma acertada las condiciones de control impuestas en los ensayos experimentales. De ahí su aplicación directa en el campo de la imagen cuantitativa de emisiones de vehículos y otras fuentes de transporte, como se mostrará en la sección 5.6 para el caso de un motor Diesel.

5.1. Análisis introductorio

Para una mayor claridad en la exposición, describiremos el procedimiento de ajuste asumiendo que un único gas (y, en concreto, CO_2) es el responsable de todas las líneas de absorción que se encuentran en la región espectral medida. La generalización a un conjunto de especies mayor es relativamente simple, dado que basta con incluir los parámetros de densidad de columna adicionales, compartiendo todos ellos un único valor de temperatura.

Basándonos en la figura 5.1, en la que se muestra el diagrama de flujo del algoritmo

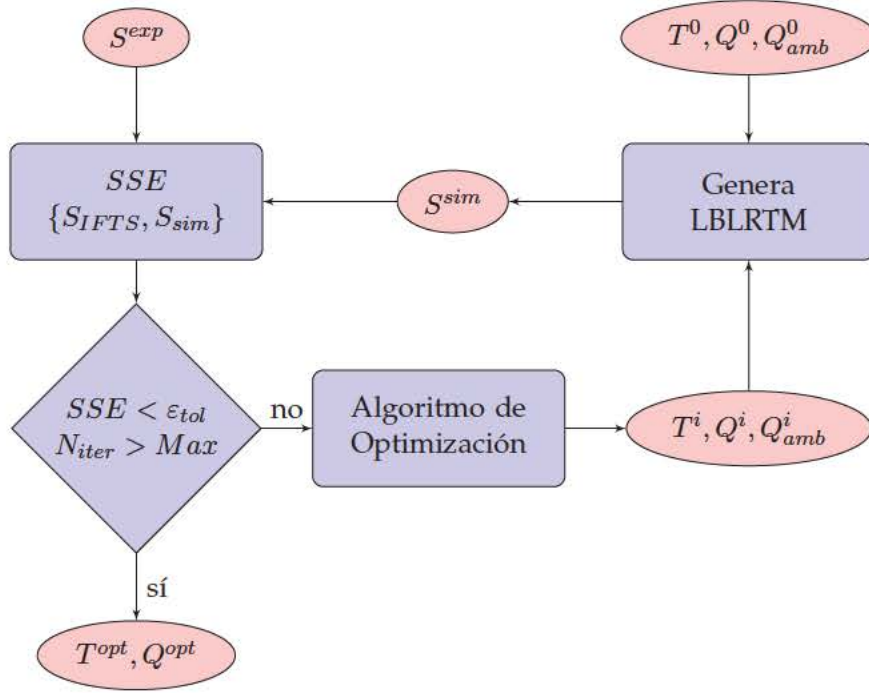


Figura 5.1: Diagrama de flujo del algoritmo de ajuste para la concentración y la temperatura, en cada píxel (x, y) .

empleado, podemos realizar una descripción más completa de la secuencia de pasos necesaria para obtener la dupla de valores (densidad de columna, temperatura) óptimos de forma simultánea. Para todo píxel (x, y) de la imagen, se realiza lo siguiente:

1. Se selecciona un punto de inicio para el algoritmo, en el que deberemos establecer un valor inicial para T^0, Q^0, Q_{amb}^0 , donde T^0 es la temperatura del gas, Q^0 su densidad de columna y Q_{amb}^0 su densidad de columna ambiente, en caso de que esté presente en la atmósfera y no se disponga de su valor por otro procedimiento.
2. Con estos valores se genera una simulación S^{sim} mediante el modelo radiométrico (línea a línea) que corresponda a la magnitud experimental, S^{exp} . En función del modo seleccionado (emisión o absorción), se emplearán radiancias o transmitancias respectivamente. Este punto se explicará con mayor detalle en la sección 5.3.3.
3. El modelo radiométrico ha de contemplar las condiciones de medida del instrumento, especialmente en términos de su resolución espectral. Los espectros ideales del apartado anterior serán adaptados para incluir las distorsiones de la medida experimental, de modo que puedan ser comparados con los datos experimentales. Dichos efectos se describen detenidamente en el apartado 5.2.
4. Se evalúa la bondad de la simulación correspondiente a los valores T^i, c^i, Q_{amb}^i , calculando la suma del error cuadrático (SSE, *Sum Square Error*) de la diferencia entre ésta y los datos experimentales (véase sección 5.4 para más detalles). Este valor es

el que se intenta minimizar, y en función del dato obtenido nos encontraremos en casos diferentes:

- a) Si el valor del SSE es lo suficientemente bajo o bien apenas sufre variaciones durante un cierto número de iteraciones, o se ha superado el número máximo de éstas, el algoritmo finaliza, estableciéndose como valores óptimos T^{opt} , Q^{opt} , los correspondientes a la última iteración.
- b) En caso contrario, se establece un nuevo valor de T^i , Q^i , Q_{amb}^i para la siguiente iteración. La selección de los nuevos valores viene determinada por el algoritmo de optimización empleado, ya que el paso utilizado repercutirá tanto en la convergencia del algoritmo como en el tiempo en que se alcance ésta.

En las siguientes secciones desarrollaremos cada una de las etapas requeridas por el mecanismo de ajuste iterativo propuesto. Comenzaremos analizando los efectos producidos por el equipo de medida, para posteriormente desarrollar distintas aproximaciones radiométricas que, incluyendo dichos efectos, también puedan implementarse mediante modelos teóricos. Y, por último, trataremos más detalles relativos a la estrategia de ajuste iterativo.

5.2. Efectos del equipo de medida

El modelo radiométrico que describíamos en la sección 2.5.1, dentro de la parte introductoria de esta tesis, nos permitía conocer con detalle la radiancia incidente en el equipo de medida, obteniendo las expresiones siguientes (2.33 y 2.34) para un píxel con y sin presencia de gas, \mathcal{L}_g y \mathcal{L}_{ref} respectivamente:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_g &= \mathcal{L}_{CN}(T_b)\varepsilon_b\tau_{a_1}\tau_g\tau_{a_2} + \mathcal{L}_{CN}(T_g)(1 - \tau_g)\tau_{a_2} \\ \mathcal{L}_{ref} &= \mathcal{L}_{CN}(T_b)\varepsilon_b\tau_{a_1}\tau_{a_2}\end{aligned}$$

Naturalmente, no tendremos acceso directo a las radiancias reales ($\mathcal{L}_{det}(\nu)$) sino que sólo recuperaremos una versión distorsionada por nuestro instrumento de medida, cuyo efecto se resume en la aparición de un *offset*, la convolución del espectro real con la función de respuesta espectral del equipo (ILS) y la aplicación de una ganancia espectral, tal y como se escribió en la ecuación 4.28 y que aquí reproducimos de nuevo:

$$S^{exp}(\nu) = G(\nu) \cdot \left[\left(\mathcal{L}_{det}(\nu) + \mathcal{L}_{off}(\nu) \right) * ILS(\nu) \right]$$

Cuando describíamos el proceso de calibración estábamos despreciando de forma implícita el efecto de la convolución con la ILS, ya que tanto $G(\nu)$ como $\mathcal{L}_{off}(\nu)$ suelen presentar un comportamiento suave en el dominio espectral. Sin embargo, los espectros que nos disponemos a medir estarán bastante alejados de esta norma, puesto que justamente pretendemos resolver la estructura fina de la *firma espectral* de los compuestos bajo análisis, que presentará un aspecto semejante al coeficiente de absorción que se mostraba en la figura 2.5. Además, en esta descripción también hemos desestimado aquellos efectos

ópticos que impliquen la propagación de energía de unos píxeles a otros, como efectos de desenfoque, MTF (véase sección 2.4.2) o similares.

Si consideramos estos efectos sobre las radiancias correspondientes a los casos de presencia o ausencia de gas, \mathcal{L}_g y \mathcal{L}_{ref} , los espectros experimentales que obtendríamos (S_g^{exp} y S_{ref}^{exp}), ahora expresados en unidades arbitrarias, vendrían dados por las siguientes expresiones:

$$S_g^{exp}(\nu) = \int_{\langle BW \rangle} G(\nu') [\mathcal{L}_{CN}(\nu', T_b) \varepsilon_b \tau_{a_1}(\nu') \tau_g(\nu') \tau_{a_2}(\nu') + \mathcal{L}_{CN}(\nu', T_g) (1 - \tau_g(\nu')) \tau_{a_2}(\nu') + \mathcal{L}_{off}(\nu')] \cdot \text{ILS}(\nu - \nu') d\nu' \quad (5.1)$$

$$S_{ref}^{exp}(\nu) = \int_{\langle BW \rangle} G(\nu') [\mathcal{L}_{CN}(\nu', T_b) \varepsilon_b \tau_{a_1}(\nu') \tau_{a_2}(\nu') + \mathcal{L}_{off}(\nu')] \cdot \text{ILS}(\nu - \nu') d\nu' \quad (5.2)$$

5.3. Modelo radiométrico

Como se explicó en el apartado 2.5.4, una forma precisa de determinar experimentalmente tanto temperatura como concentración sería emplear el método E-T (*emission transmission*), ya que nos proporciona una estimación de la transmitancia experimental que permite su posterior desacoplamiento. Sin embargo, su aplicabilidad puede verse muy reducida dado que resulta complejo asegurar una completa reproducibilidad de la masa de gases, aún cuando se lleve a cabo bajo condiciones controladas propias de un laboratorio. Además de que en muchas aplicaciones reales literalmente no podemos considerar múltiples medidas con un fondo de temperatura cambiante; y es más común que nos encontremos en alguna de las dos aproximaciones posibles: emisión o absorción.

5.3.1. Modo activo o de absorción

En el caso de la aproximación de absorción, llamado también modo activo, la radiación proveniente del fondo constituye la mayor parte de la energía incidente y la información relativa a concentración y temperatura se encuentra fundamentalmente en la *huella* que el gas produce en la radiación cuando es atravesado por ésta. Si además contamos con la posibilidad de medir o estimar la radiación en ausencia de gas, el cálculo de la transmitancia nos proporciona una magnitud muy sensible a las variaciones de concentración y, aunque en menor medida, también a las de temperatura. Además, al ser una medida relativa, basada en un cociente, reduce en gran parte la influencia de fuentes de error, como el valor desconocido de la concentración ambiente o de la señal procedente del *background*; eliminando a su vez la necesidad de contar con una calibración radiométrica de nuestro equipo (encargada de traducir unidades arbitrarias en radiancia espectral), lo cual reduce también las incertidumbres que normalmente se asocian a este proceso. La expresión 5.1 se simplifica al despreciar el término de emisión, quedando:

$$S_{g,abs}^{exp}(\nu) \approx \int_{\langle BW \rangle} G(\nu') [\mathcal{L}_{CN}(\nu', T_b) \varepsilon_b \tau_{a_1}(\nu') \tau_g(\nu') \tau_{a_2}(\nu') + \mathcal{L}_{off}(\nu')] \cdot \text{ILS}(\nu - \nu') d\nu' \quad (5.3)$$

Como explicábamos en el apartado 2.5.3, para obtener la transmitancia necesitamos llevar a cabo dos medidas sobre un fondo que emita una cantidad de energía notable, lo que equivale a que éste se encuentre a una temperatura elevada. Estas las denotaremos como $S_{g,abs}^{exp}(\nu)$ y $S_{ref}^{exp}(\nu)$, realizadas con y sin presencia del gas de medida, y la transmitancia experimental obtenida τ_g^{exp} vendría determinada por:

$$\tau_g^{exp}(\nu) \equiv \frac{S_{g,abs}^{exp}(\nu) - B_{off}(\nu)}{S_{ref}^{exp}(\nu) - B_{off}(\nu)} \quad (5.4)$$

Donde $B_{off}(\nu)$ representa el nivel de radiación espúrea procedente del interior del equipo, esto es, a la vista de la ecuación 5.3:

$$B_{off}(\nu) \approx \int_{\langle BW \rangle} G(\nu') \cdot \mathcal{L}_{off}(\nu') \cdot ILS(\nu' - \nu) d\nu' \quad (5.5)$$

Este término podrá estimarse haciendo una medida experimental de un fondo a muy baja temperatura. El espectro de la expresión 5.4 es el que tendrá que ser reproducido por la transmitancia espectral teórica generada a partir del modelo radiométrico LBLRTM, función de Q_g y T_g .

Si desarrollamos la ecuación anterior para la transmitancia de la pluma de gases medida por nuestro equipo, y asumimos de nuevo que $G(\nu)$ presenta una variación muy suave en términos de la anchura de la ILS, en la práctica ésta puede simplificarse en:

$$\tau_{g,abs}^{exp}(\nu) = \frac{\int_{\langle BW \rangle} [\mathcal{L}_{CN}(\nu', T_b) \varepsilon_b \tau_a(\nu') \tau_g(\nu') + \mathcal{L}_{off}(\nu')] \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu' - B_{off}(\nu)}{\int_{\langle BW \rangle} [\mathcal{L}_{CN}(\nu', T_b) \varepsilon_b \tau_a(\nu') + \mathcal{L}_{off}(\nu')] \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu' - B_{off}(\nu)} \quad (5.6)$$

donde $\tau_a(\nu) = \tau_{a1}(\nu) \cdot \tau_{a2}(\nu)$.

5.3.2. Caso general

Si la propia emisión de la pluma no pueda ser despreciada, el modelo radiométrico completo, con términos de emisión y absorción, ha de ser considerado. Podemos seguir trabajando con el cociente experimental (5.4) pero ahora no representa la verdadera transmitancia del gas, ya que cuando el término de emisión es importante sólo puede obtenerse mediante el método E-T, sino una transmitancia nominal o aparente, cuyo ajuste nos permite sin embargo recuperar los valores de T y Q. La expresión de esta transmitancia aparente será:

$$\tau_{g,compl}^{exp}(\nu) = \tau_{g,abs}^{exp}(\nu) + \frac{\int_{\langle BW \rangle} G(\nu') [\mathcal{L}_{CN}(\nu', T_g) \cdot (1 - \tau_g(\nu')) \tau_a(\nu') + \mathcal{L}_{off}(\nu')] \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'}{\int_{\langle BW \rangle} G(\nu') [\mathcal{L}_{CN}(\nu', T_b) \varepsilon_b \tau_a(\nu') + \mathcal{L}_{off}(\nu')] \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'} \quad (5.7)$$

La radiancia emitida por la nube de gases será relevante cuando se den las siguientes condiciones: que las temperaturas alcanzadas sean comparables a las del fondo y además la transmitancia espectral de la pluma en la banda de interés sea baja (y su emisividad alta). Así, la importancia de la emisión puede ser minimizada mediante una adecuada selección de la región espectral donde se lleva a cabo el proceso de ajuste. En cualquier caso, incorporar los términos de emisión en el modelo sólo conlleva tiempos de cómputo algo mayores, pero no tiene efectos significativos en la convergencia del algoritmo de ajuste.

5.3.3. Síntesis espectral de LBLRTM

Recordemos que nuestra metodología se basa en reproducir mediante simulaciones la transmitancia aparente experimental $\tau_g^{exp}(\nu)$ que, tal y como es observada por nuestro sistema de imagen FTIR, viene descrita por las expresiones 5.6 y 5.7. Esto equivale a construir las versiones teóricas $\tau_{g,abs}^{sim}(\nu)$ y $\tau_{g,compl}^{sim}(\nu)$ a partir del desarrollo de un simulador de LBLRTM (*Line-by-Line Radiative Transfer Model*).

Para generar espectros sintéticos el punto de partida es conocer los parámetros espectroscópicos fundamentales de las moléculas del gas bajo análisis. Para ello, existen diferentes bases de datos, algunas ya mencionadas en este trabajo como HITRAN, u otras como CDSD-4000 [124], NIST [67] o Pacific Northwest National Laboratory (PNNL) [129], entre las más populares. En nuestro caso, hemos seleccionado HITRAN, ya que dispone de una gran cantidad de líneas e intensidades para un buen número de compuestos de interés en la región infrarroja del espectro. Además de ser gratuita, dispone de diferentes implementaciones que permiten la síntesis de parámetros espectrales muy diversos e incluso ofrece la posibilidad de incluir en el cálculo posibles influencias instrumentales y la dependencia con la temperatura. Una de dichas implementaciones está alojada en la Web, *HITRAN on the Web* [141], de la cual es responsable el Instituto Ruso de Óptica Atmosférica, y, más recientemente, surgió la implementación *HAPI* [64]; una API provista de servidores con librerías en lenguaje Python, que calcula mediante modelos "línea a línea" (LBLRTM) el espectro del coeficiente de absorción ($\kappa = aC$ [cm^{-1}]) u otros parámetros como transmitancias (τ), absorbancias (A), etc.

Lograr un ajuste adecuado entre las simulaciones y los datos experimentales puede requerir de un gran número de iteraciones, de forma que los espectros teóricos deben generarse de forma ágil y rápida, sin tener que recurrir a una aplicación web o expresiones analíticas complejas que recompongan los parámetros necesarios cada vez que la temperatura o la concentración varíen. Aligerar este proceso depende en gran medida de modelar eficientemente la dependencia de la absorptividad con la temperatura, al menos en un cierto intervalo de valores. La estrategia que hemos seguido consiste en aproximar dicha dependencia por una función simple y previamente estimada a partir de un gran número de simulaciones de κ , cada una de ellas a diferentes temperaturas y con la máxima resolución espectral disponible en HITRAN ($0,01\ cm^{-1}$). Para ello empleamos unas condiciones de presión estándar ($1\ atm$), y un perfil de ensanchamiento de Voigt, junto a una abundancia del 100 %, por lo que, dado que $\kappa = aC$, κ así calculado es numéricamente equivalente a la absorptividad (a) si las concentraciones son medidas en unidades de tanto por uno a presión atmosférica.

La dependencia de κ con la temperatura, para cada longitud de onda, ha sido ajustada mediante funciones polinómicas, dada la suavidad de las variaciones producidas, que puede comprobarse en el ejemplo mostrado de la figura 5.2 correspondiente a CO_2 , en la que un polinomio de orden 3 basta para alcanzar un excelente grado de ajuste a la vista de los residuos obtenidos. Mediante este procedimiento, toda la información necesaria para poder generar espectros sintéticos queda sintetizada en tan sólo 4 parámetros por cada número de onda (ν), de acuerdo a la expresión:

$$a(T_g, \nu) = p_3(\nu) \cdot T_g^3 + p_2(\nu) \cdot T_g^2 + p_1(\nu) \cdot T_g + p_0(\nu) \quad (5.8)$$

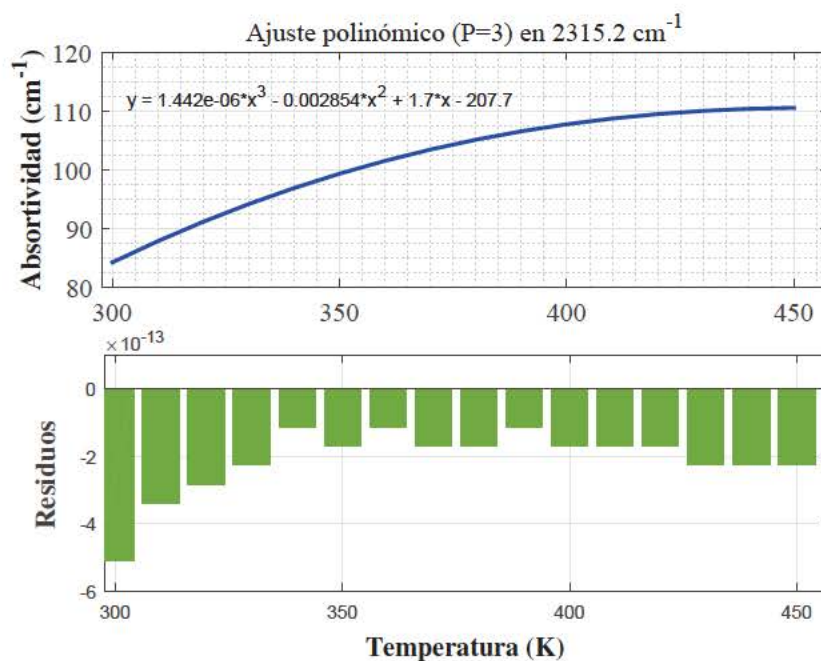


Figura 5.2: Ejemplo de ajuste de la influencia de la temperatura en la absorbancia en el caso de CO_2 y un polinomio de orden 3.

Para el caso del CO_2 la dependencia de la absorbancia con la temperatura ha sido parametrizada en la región espectral entre los 2000 y los 2400 cm^{-1} , con una resolución espectral de 0,01 cm^{-1} . Aunque este paso pueda no ser suficiente como para reproducir la forma de algunas líneas individuales, que pueden ser tan estrechas como 0,01 cm^{-1} en el CO_2 , su efecto es muy pequeño si lo comparamos con el espectro *ensanchado* por el equipo de medida, que será el que emplearemos en el ajuste. Un ejemplo de la dependencia de la absorbancia con la temperatura para el CO_2 en algunas longitudes de onda específicas se muestra en la figura 5.3. Se obtiene que el coeficiente de absorción depende fuertemente de ν (donde los valores mostrados han sido calculados para los valores exactos indicados en la leyenda de la figura).

Por último, podemos concluir que con esta parametrización es relativamente sencillo construir espectros de transmitancia para valores arbitrarios de T y Q , a partir de la expre-

sión dada por la ley de Lambert-Beer. Es necesario remarcar el hecho de que mediremos concentraciones bajo la asunción de presión atmosférica, por lo que si la presión total de la mezcla de gases se ve alterada, la concentración recuperada por nuestro método ha de ser corregida en la misma proporción, para que así las unidades continúen representando un valor porcentual a la presión real.

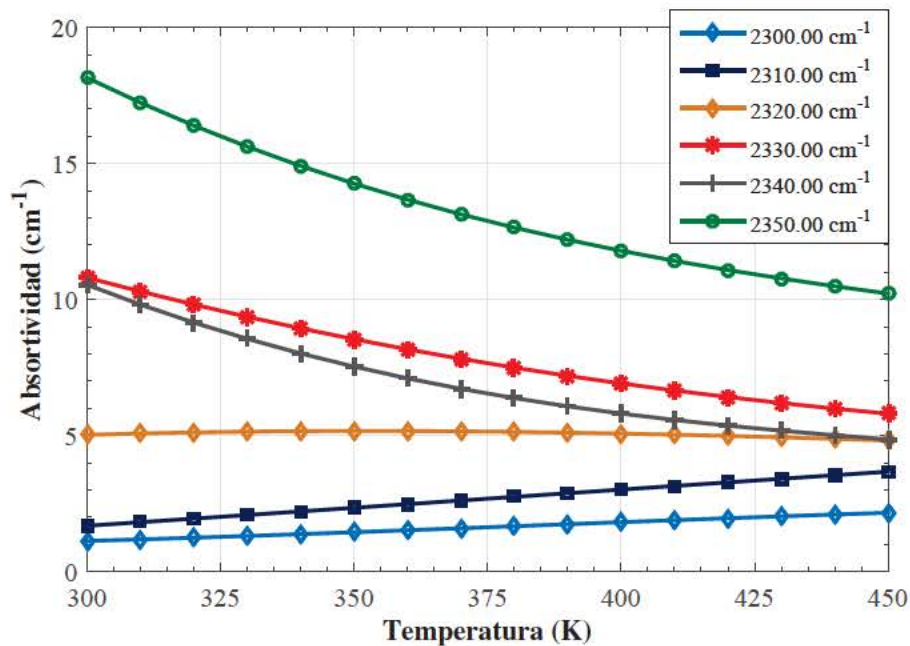


Figura 5.3: Dependencia de la temperatura del CO_2 a diferentes números de onda. La dependencia con ν es muy acusada de forma que para números de onda muy cercanos los resultados pueden llegar a ser radicalmente diferentes. Las líneas continuas representan los ajustes mediante polinomios de tercer orden.

5.3.4. Efectos instrumentales en simulaciones de LBLRTM

Hasta este punto hemos construido espectros de muy alta resolución, ideales y sin distorsión alguna, que contienen las características líneas de absorción con su ancho intrínseco a presión y temperatura atmosféricas. En nuestro caso, esta situación se encuentra relativamente alejada de la situación experimental, y para que dichas líneas puedan ser comparadas con espectros empíricos han de ser previamente procesadas para que incluyan los efectos instrumentales asociados al equipo de medida. Como ya se mencionaba al analizar la distorsión provocada por nuestro sistema, el procedimiento consiste en convolucionar dichas líneas con la función de respuesta del equipo (ILS) y así incorporar los efectos de emplear un interferómetro de Michelson de resolución finita. En nuestro caso, emplearemos una apodización de tipo triangular a la resolución espectral de medida, por lo que la ILS vendrá dada por la transformada de Fourier de ésta: el cuadrado de la función *sinc* [34]; como se muestra en las figuras 5.4 y 5.5.

En la figura 5.4 se muestran las funciones de respuesta correspondientes al uso de

diferentes resoluciones de medida. Junto a esta, en la figura 5.5 se representa el resultado obtenido tras la convolución entre las funciones anteriores y un espectro de radiancia teórica de cuerpo negro al que se le ha aplicado una transmitancia de dióxido de carbono típica. En esta última representación se hace notoria la importancia de contar con una estimación precisa de la ILS del equipo, de forma que el modelo teórico sea estrictamente comparable con la medida.

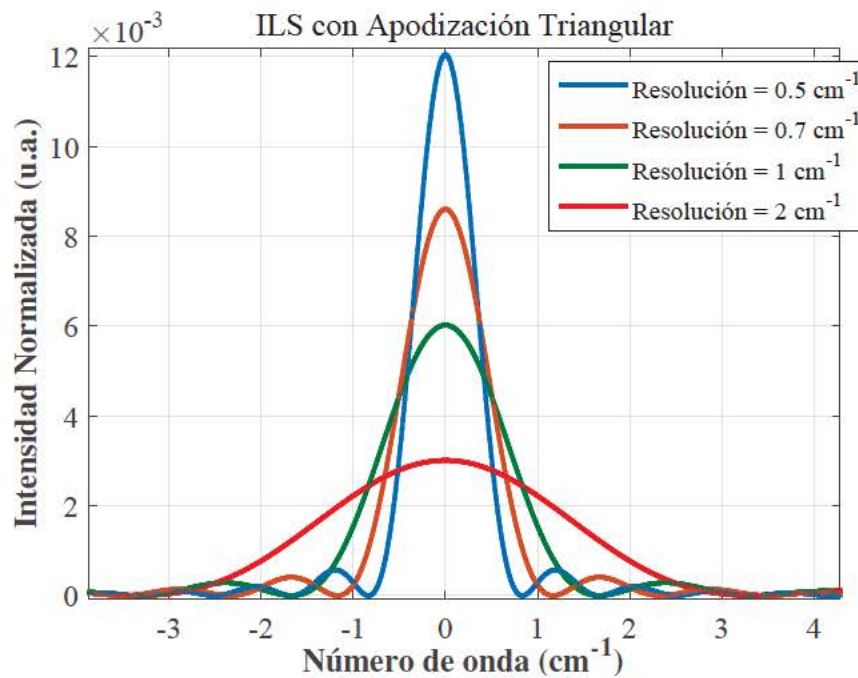


Figura 5.4: ILS para el caso de apodización triangular y distintas resoluciones de medida.

Hay que advertir, sin embargo, de un detalle importante: para calcular el espectro de transmitancia teórico $\tau_g^{sim}(\nu)$, convolucionar el espectro ideal con la función ILS no es lo correcto. La razón es que $\tau_g^{sim}(\nu)$ será comparada con el espectro de transmitancia experimental $\tau_g^{exp}(\nu)$ y éste no es medido directamente, sino que se obtiene a partir de una relación (ver ecuación 5.4) entre dos espectros de radiancia medidos por nuestro instrumento, S_g^{exp} y S_{ref}^{exp} . Aquí los términos correspondientes a la transmitancia atmosférica y la radiancia de cuerpo negro se cancelarían para un espectro ideal, lo cual no es válido para un espectro experimental, puesto que ambos estarían afectados por la resolución del instrumento de medida. Por lo tanto, el espectro correcto $\tau_g^{sim}(\nu)$ debe ser calculado como la ratio de las dos radiancias (medida y referencia) *ensanchadas* tal y como se muestra en las ecuaciones 5.6 y 5.7, aunque ahora prescindiendo de los términos de responsividad espectral y *offset*. En las que $\tau_g(\nu)$ y $\tau_a(\nu)$ representan los espectros de transmitancia ideales de tanto la pluma de gases como de la atmósfera, respectivamente, tal y como los provee HITRAN. Ambas son funciones de la temperatura (T_g , T_a) y de la densidad de columna (Q_g , Q_a), aunque no se indique de forma explícita en aras de mantener una notación lo más simple posible.

En el caso del modo de absorción, ecuación 5.6, es posible considerar que la función de

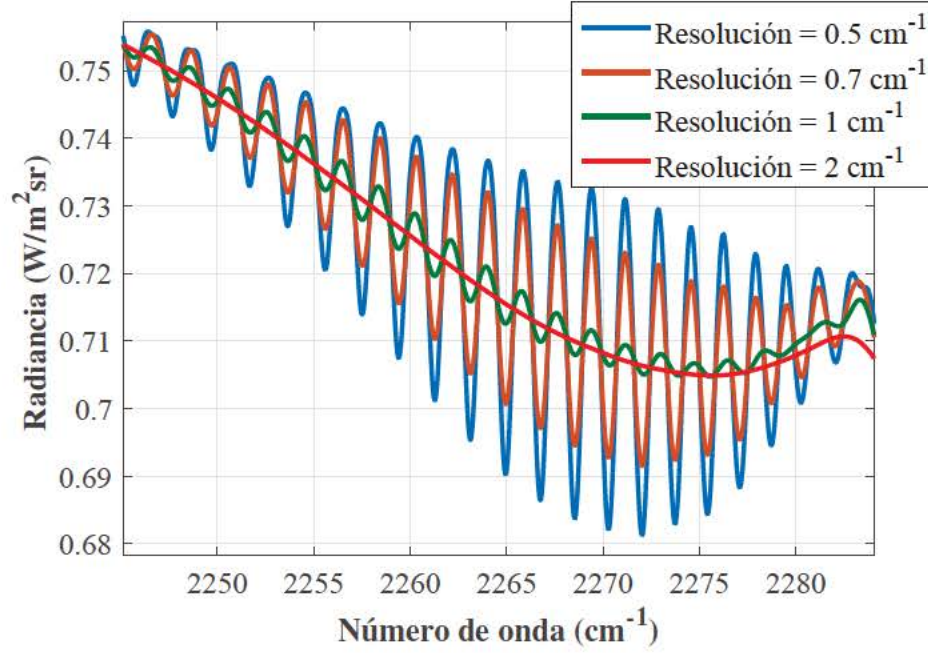


Figura 5.5: Gráfica con las radiancias obtenidas tras la convolución de las funciones de transferencia de la figura 5.4 con un espectro de radiancia de un cuerpo negro a 350°C y un perfil de transmitancia de CO₂.

cuerpo negro asociada al *background* tiene un perfil espectral relativamente plano, y este mismo comportamiento puede esperarse de ε_b , por lo que la convolución con ILS apenas los afecta y podremos considerar la aproximación mostrada en la expresión 5.9:

$$\begin{aligned} \tau_{g,abs}^{sim}(\nu) &= \frac{\int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}_{CN}(\nu', T_b) \cdot \varepsilon_b \cdot \tau_a(\nu') \cdot \tau_g(\nu') \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'}{\int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}_{CN}(\nu', T_b) \cdot \varepsilon_b \cdot \tau_a(\nu') \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'} \\ &\approx \frac{\int_{\langle BW \rangle} \tau_a(\nu') \cdot \tau_g(\nu') \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'}{\int_{\langle BW \rangle} \tau_a(\nu') \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'} \end{aligned} \quad (5.9)$$

Análogamente, para reproducir la transmitancia correspondiente al caso general, estas aproximaciones no bastan para simplificar la expresión 5.7 de forma tan apreciable, debido fundamentalmente a la presencia del término de emisión. Desestimando el término de la responsividad espectral, y asumiendo que la radiación espúrea ha sido sustraída (ecuación 5.4), la ecuación que emplearemos es:

$$\tau_{g,compl}^{sim}(\nu) \approx \tau_{g,abs}^{sim}(\nu) + \frac{\int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}_{CN}(\nu', T_g) \cdot (1 - \tau_g(\nu')) \cdot \tau_a(\nu') \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'}{\int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}_{CN}(\nu', T_b) \cdot \varepsilon_b \cdot \tau_a(\nu') \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'} \quad (5.10)$$

En cambio, el efecto del término correspondiente a la transmitancia atmosférica, $\tau_a(\nu')$, no puede ser simplificado. Por lo tanto, a través del ensanchamiento instrumental, los valores de T_a y Q_a afectan en cierta medida al espectro experimental. Este efecto es pequeño comparado con los valores habituales de concentraciones y distancias que serán medidos, pero, en general, no podrá considerarse como despreciable (y más aún cuando tratemos de medir concentraciones de CO_2 en una pluma de gases, puesto que el CO_2 es uno de los compuestos de la atmósfera terrestre).

A modo de ejemplo, si imaginamos una nube de gases con una densidad de columna de CO_2 de $5 \cdot 10^3 \text{ ppm} \cdot m$, si el camino atmosférico es $3 m$ con $[CO_2] = 400 \text{ ppm}$ (valor típico en la superficie atmosférica), las simulaciones muestran como ignorar los efectos atmosféricos puede significar un error $> 5 \%$ en las concentraciones de CO_2 recuperadas. Así, para una estimación precisa de los parámetros de la pluma, T_a and Q_a deberían bien haber sido previamente estimados o considerados como parámetros adicionales que el algoritmo de ajuste contemple.

5.4. Método iterativo para la recuperación de Q/T

Para cada píxel (x, y) tenemos que encontrar la dupla de valores (Q_g, T_g) para la que el espectro sintético $\tau_g^{sim}(\nu, Q_g, T_g)$ nos proporciona el mejor nivel de ajuste con el espectro experimental $\tau_g^{exp}(\nu)$; lo que traduciremos como aquellos valores que minimicen la suma del error cuadrático (SSE) entre ambos, τ_g^{sim} y τ_g^{exp} .

$$(\hat{Q}_g, \hat{T}_g) = \underset{Q_g, T_g}{\operatorname{argmin}} \left\{ \sum_{\nu \in BW} \|\tau_g^{sim}(\nu) - \tau_g^{exp}(\nu)\|^2 \right\} \quad (5.11)$$

Los espectros experimentales han sido adquiridos por el sistema de imagen hiperspectral Telops FIRST-MW, descrito en el capítulo 4. Recordemos que empleaba un interferómetro de Michelson para modular la radiación incidente, que después es captada por medio de un array de 320×256 detectores de InSb, sensible en el infrarrojo medio (de 1800 a 5000 cm^{-1}). Cada uno de dichos píxeles adquiere un interferograma con una longitud capaz de proporcionar una resolución espectral de $0,25 \text{ cm}^{-1}$, aunque en este trabajo se ha optado por una resolución de $0,5 \text{ cm}^{-1}$, a priori suficiente como para resolver las líneas de CO_2 y que permite, a su vez, reducir los ya elevados tiempos de adquisición. Además de en el capítulo anterior, es posible encontrar información adicional sobre este sistema de medida en la literatura, ver [15, 30].

Para poder comparar dos espectros, ambos han de disponer del mismo número de puntos y estos han de corresponder exactamente a los mismos números de onda. Para los $0,5 \text{ cm}^{-1}$ de resolución nominal seleccionada en los espectros experimentales, la separación entre números de onda consecutivos es de $0,417 \text{ cm}^{-1}$. Sin embargo, esta resolución es pobre comparada con los espectros teóricos y, por lo tanto, los interferogramas son extendidos mediante ceros adicionales (*padding*) en un factor 7, de forma que el paso resultante en el eje de números de onda de $\tau_g^{exp}(\nu)$ es reducido a $0,0595 \text{ cm}^{-1}$.

Como se describía en el capítulo 4, el eje de números de onda del espectro experimental debe ser corregido debido a que en el interferómetro de Michelson existe cierta desviación angular para todos aquellos píxeles fuera del eje óptico. La corrección se traducía

en un determinado factor multiplicativo que actúa sobre los números de onda obtenidos [37], y que podía ser estimado a partir de líneas de absorción bien conocidas. En nuestro caso, empleábamos la línea de vapor de agua ubicada en 1918 cm^{-1} . Sin embargo, ello conlleva que los espectros experimentales tomen valores en números de onda ligeramente diferentes para distintos píxeles, por lo que si deseamos disponer de un eje de números de onda común para la imagen completa, es necesario interpolar el espectro resultante previo a la aplicación del proceso de ajuste.

Para cada píxel, el procedimiento de ajuste que se expuso de manera introductoria en la sección 5.1 puede explicitarse de la siguiente forma:

1. Asumiremos ciertos valores iniciales para las duplas de valores (Q_g, T_g) y (Q_a, T_a) .
2. Con ellos se pasan a calcular los espectros de transmitancia ideal, τ_g, τ_a , evaluando las expresiones 5.8 y utilizando la ley de Lambert-Beer en los puntos correspondientes al eje de números de onda del espectro experimental, y que componen el modelo línea a línea (LBLRTM) ideal.
3. A partir de ahí se introduce el efecto convolutivo de la ILS en el espectro teórico τ_g^{sim} , que es calculado siguiendo la ecuación 5.6, que incluye el ensanchamiento instrumental del sistema hiperespectral, o mediante 5.7 si la emisión de la pluma no puede ser despreciada, sin considerar claro está radiación espúrea de ningún tipo.
4. Tras esto se calculan y suman en cuadratura las diferencias con τ_g^{exp} para cada número de onda dentro de la región de ajuste seleccionada, hasta obtener el valor del SSE.
5. Se emplea el método de Nelder-Mead [83, 86] perteneciente a la familia de técnicas de búsqueda heurística para resolver el problema de minimización, dado que es un algoritmo fácil de implementar y configurar, además de ser indicado para problemas de optimización no lineales en espacios de múltiples dimensiones. Utilizaremos su implementación en el paquete de optimización del entorno MatLab para encontrar los valores de (Q_g, T_g) con los que probar en la siguiente iteración, hasta que se alcanza la convergencia. También es posible incluir la estimación de Q_a en caso de que sea necesario, sin que afecte de forma apreciable a la convergencia del algoritmo.

Este proceso se describe en el esquema mostrado en la figura 5.1, y es repetido para todos y cada uno de los píxeles hasta obtener los correspondientes mapas de densidad de columna y temperatura.

En la figura 5.6 se muestra un ejemplo característico del tipo de funciones que se intenta minimizar, esto es, la suma del error cuadrático de la diferencia entre los datos experimentales y el modelo para un píxel dado, en función de las variables temperatura y concentración. Se comprueba un comportamiento suave y libre de discontinuidades, además de la ausencia de mínimos locales, lo que facilita en gran medida la elección de la estrategia de optimización.

Como cualquier otro método basado en un ajuste iterativo, cabe el riesgo de que en algún caso el algoritmo empleado diverja o no sea capaz de alcanzar el mínimo global. Por esto, se deja abierta la puerta al uso de otro tipo de algoritmos o métodos de optimización

si demostraran una más rápida convergencia y robustez frente a mínimos locales que el aquí propuesto.

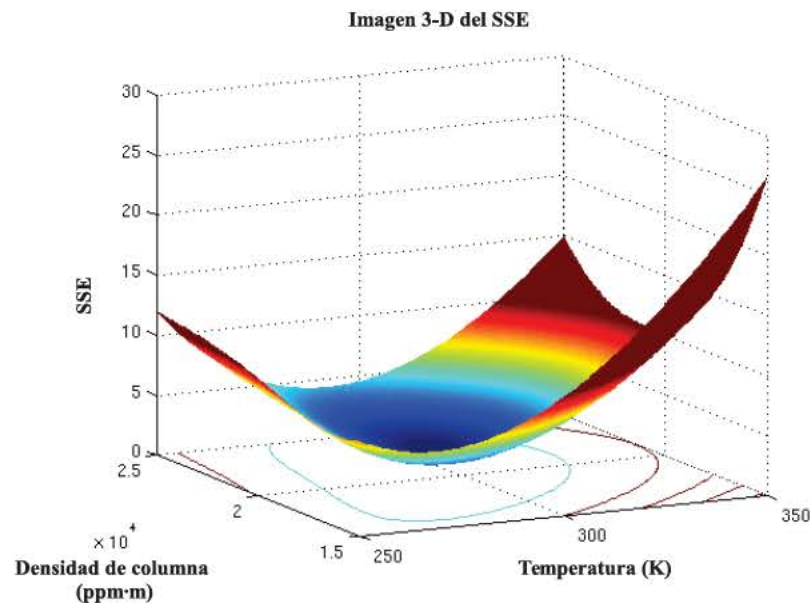


Figura 5.6: Representación en 3 dimensiones del mapa de errores para el ajuste de temperatura y concentración sobre un espectro típico de transmitancia, correspondiente a 10 cm de camino óptico con un 25 % de concentración de CO_2 , adquirido a una distancia de 2.75 metros.

5.5. Experimento de validación

Una vez desarrolladas a lo largo del capítulo 4 todas las funciones necesarias para procesar adecuadamente las imágenes hiperespectrales de tipo FTIR, junto a las implementaciones del modelo radiométrico (LBLRTM) analizado hasta ahora, es tiempo de validar experimentalmente todas las hipótesis realizadas. El objetivo es analizar y, en caso afirmativo validar, los resultados proporcionados por medidas correspondientes a escenarios representativos en un entorno controlado de laboratorio. El trabajo expuesto en esta sección y la siguiente ha sido publicado en [103].

Para ello proponemos medir con el equipo Telops FIRST-MW una salida de gas controlada, de concentración conocida, y temperatura superior a la del ambiente, del orden de unos 100°C . El escape de gas se caracteriza por tener una sección circular, de forma que el camino óptico también puede estimarse con facilidad para cada píxel; lo cual nos permitirá disponer de puntos (Q, T) de validación a lo largo de un rango amplio valores a partir de un único experimento.

5.5.1. Descripción de la configuración de medida

Emplearemos una tubería hueca de cobre, con un diámetro interno de $15,7\text{ mm}$, que quedará dispuesta verticalmente, tal y como se muestra en la figura 5.7, y se conectará a

una bombona de gas calibrada con una concentración del 100 % de CO_2 . De otra parte, una superficie radiante, de alta emisividad, con dimensiones $29,5 \times 29,5 \text{ cm}^2$ y temperatura $T = 600^\circ\text{C}$ (no mostrada en la figura 5.7), fue colocada muy próxima a la parte inferior de la tubería con el objetivo de inducir un calentamiento en la tubería de cobre y, consecuentemente, en el flujo de gas. Esto permite lograr un procedimiento de calentamiento preferible a dispositivos basados en combustiones (como un mechero Bunsen o similares) dado que tanto el CO_2 como el H_2O producido en las combustiones podrían interferir en el experimento.

Como fondo controlado, se ha empleado un cuerpo negro de área extensa, con una superficie de 6×6 pulgadas y un valor de emisividad nominal de $\varepsilon = 0,94$, programado a una temperatura de $T = 350^\circ\text{C}$, y ubicado justo detrás de la salida de la tubería. En la figura 5.7 se muestra un termopar controlado en la boca del tubo, para así poder disponer de un dato adicional de temperatura, de carácter orientativo.

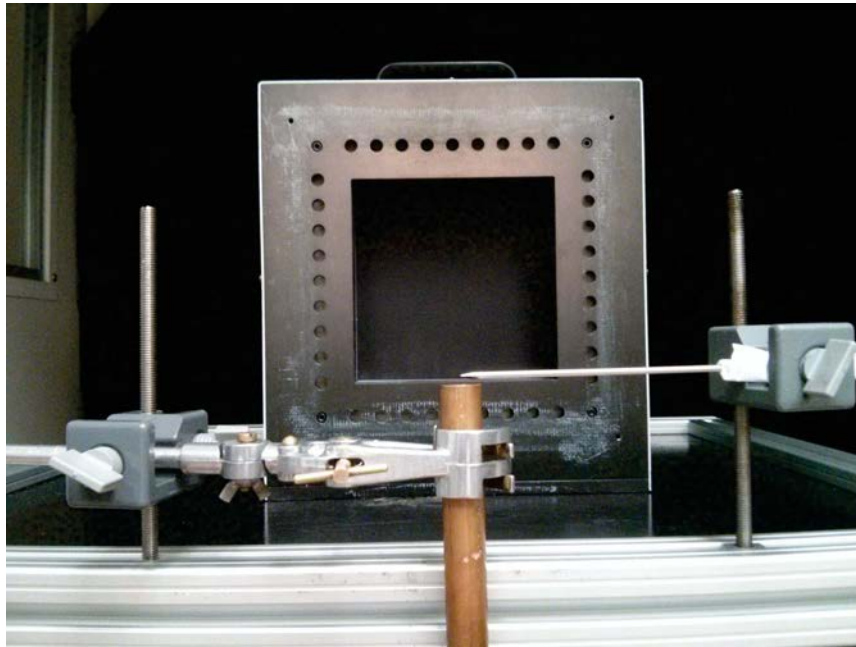


Figura 5.7: Configuración experimental empleada en las medidas de validación, desde el punto de vista del sistema de imagen hiperspectral. El CO_2 fluye a lo largo de la tubería de cobre colocada de forma vertical en el centro de la imagen, y es observada frente al cuerpo negro extenso que cumple la función de background de temperatura elevada y controlada.

El sistema FIRST-MW fue dispuesto a una distancia de $3,10 \text{ m}$ y se tomaron cuatro interferogramas tanto para las medidas de referencia (en ausencia de flujo) como para las medidas correspondientes al flujo de CO_2 . La resolución espectral elegida fue de $0,5 \text{ cm}^{-1}$ y se optó por seleccionar una ventana espacial de 120×100 píxeles. Cada conjunto de cuatro interferogramas fue pre-procesado mediante el cálculo de su mediana temporal, y posteriormente se llevó a cabo el proceso de transformación al dominio de las frecuencias espaciales mediante la transformada de Fourier y los procesados descritos en el capítulo 4, hasta obtener $S_{g,abs}^{exp}(\nu)$, $S_{ref,abs}^{exp}(\nu)$ y la estimación de offset $B(\nu)$ (a partir de una medida

sobre una superficie fría de emisión despreciable), necesarias para calcular el espectro de transmitancia experimental.

5.5.2. Región espectral de ajuste

Los espectros completos adquiridos mediante el sistema de imagen hiperespectral pueden abarcar desde aproximadamente los 1800 a los 5000 cm^{-1} . Considerando un paso en el eje espectral de 0,0595 cm^{-1} , como el que se describía en la sección anterior, esto equivale a ≈ 53800 puntos por cada píxel.

Incluso utilizando una subventana o ROI (*Region Of Interest*) de 120×100 píxeles en lugar de la imagen completa de 320×256 , el proceso de ajuste requiere de una gran cantidad de recursos de computación, debido en parte a la gran cantidad de operaciones de convolución entre el espectro ideal y la función ILS que han de llevarse a cabo en cada iteración. Además, cada gas puede presentar regiones con niveles de absorción de intensidad muy diferente, desde muy fuertes a niveles prácticamente insensibles a la concentración del gas. Por todo ello es aconsejable seleccionar una sub-región espectral óptima desde el punto de vista del proceso de ajuste.

Para el caso particular del CO_2 , la región con líneas de absorción más intensa en el rango correspondiente al infrarrojo medio, abarca desde 2280 a 2400 cm^{-1} . Sin embargo, esta gran absorción implica que, para caminos ópticos elevados, la respuesta puede llegar a saturarse (absorbiendo el medio la totalidad de la energía) sólo por la contribución del CO_2 atmosférico. Este efecto se aprecia en la figura 5.8, compuesta por un espectro de cuerpo negro a $T = 350^\circ\text{C}$ visto a través de un camino óptico de 2,75 m de atmósfera limpia (sin otras fuentes de gas) y otro en el que se añade una fuente considerable de CO_2 , a una resolución de 0,5 cm^{-1} . Incluso para aquellos casos que implican distancias de medida cortas, la región próxima al pico de mayor absorción en torno a $\sim 2350 \text{ cm}^{-1}$ será sinónimo de un escaso nivel de señal y será conveniente que la evitemos en la medida de lo posible, puesto que las transmitancias experimentales obtenidas mediante la ecuación 5.6 serán muy ruidosas. Por el contrario, se ha encontrado que las transmitancias en el intervalo espectral correspondiente a 2240-2280 cm^{-1} , correspondiente a la transición fundamental de $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ muestra una buena sensibilidad a las variaciones de concentración de CO_2 en el rango aquí estudiado. Al mismo tiempo, la relativa debilidad de las líneas de absorción halladas en dicha región conlleva que los resultados sean menos sensibles a la concentración de CO_2 atmosférico, motivos por lo cuales esta región ha sido seleccionada en el proceso de ajuste.

5.5.3. Análisis de los resultados

En la figura 5.9 se muestran los resultados obtenidos para la densidad de columna de CO_2 a lo largo de un perfil horizontal de píxeles justo por encima de la boca de la tubería, y donde la región espectral utilizada abarca desde 2240 a 2280 cm^{-1} . Estos resultados han sido obtenidos suponiendo una concentración de CO_2 ambiente de 380 ppm, ver [94], y una temperatura medida de aproximadamente $T_a = 25^\circ\text{C}$. En dicha figura se muestran dos tipos de perfiles espaciales recuperados a partir de las dos aproximaciones de la transmitancia que se han descrito: en círculos, aquellos obtenidos mediante la aproximación en absorción, y, con cuadrados, los resultados obtenidos mediante la utilización del

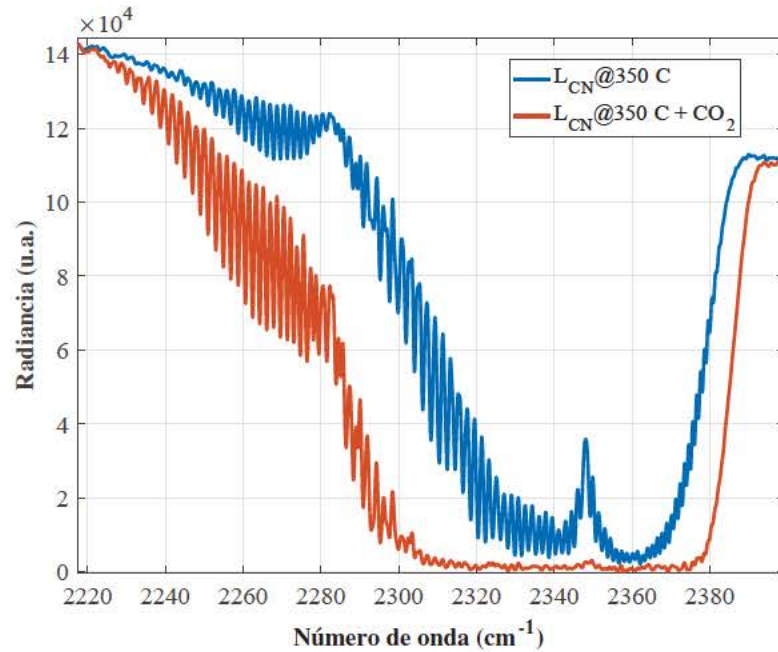


Figura 5.8: Espectros experimentales obtenidos tras las etapas de procesado propuestas en el capítulo anterior. Se muestra una comparativa entre un espectro de referencia y un segundo con una cantidad apreciable de CO_2 .

modelo radiométrico completo, el cual considera los efectos debidos a la propia emisión de la nube de gases. Ambos perfiles son comparados con el camino óptico que corresponde a cada píxel (representado en un eje vertical diferente, a la derecha de la gráfica), estimado a partir del diámetro del tubo mediante un simple cálculo geométrico. Puesto que estamos empleando una concentración de CO_2 igual al 100 %, la comparación entre las magnitudes de ambos ejes es directa: la densidad de columna en el centro del tubo debería alcanzar valores muy próximos a $Q = 15700 \text{ ppm} \cdot m$, ya que el camino óptico es de $15,7 \text{ mm}$, y debería seguir la distribución marcada por el perfil espacial correspondiente al camino óptico.

Dicha figura muestra claramente como el término de emisión tiene una contribución pequeña pero aún así apreciable, de forma que si es tomada en cuenta la densidad de columna recuperada muestra un elevado grado de acuerdo con los valores nominales, a lo largo de una amplia región en torno al centro del tubo de cobre, con errores inferiores al 1 %. Las mayores discrepancias aparecen en los bordes del tubo, donde el camino óptico cae de forma abrupta hasta valores cercanos a cero, mientras que la densidad de columna recuperada describe una variación suave. Este efecto puede explicarse por las no idealidades asociadas al sistema óptico de medida, donde la función de transferencia óptica (MTF) que engloba efectos como el desenfoque o la aberración de las lentes entre muchos otros, ocasiona una atenuación en las frecuencias espaciales altas, como es el caso de los bordes del tubo (ver ejemplo en el apartado 2.4.2).

En la figura 5.10 se muestran los resultados de nuestro método de medida, donde se

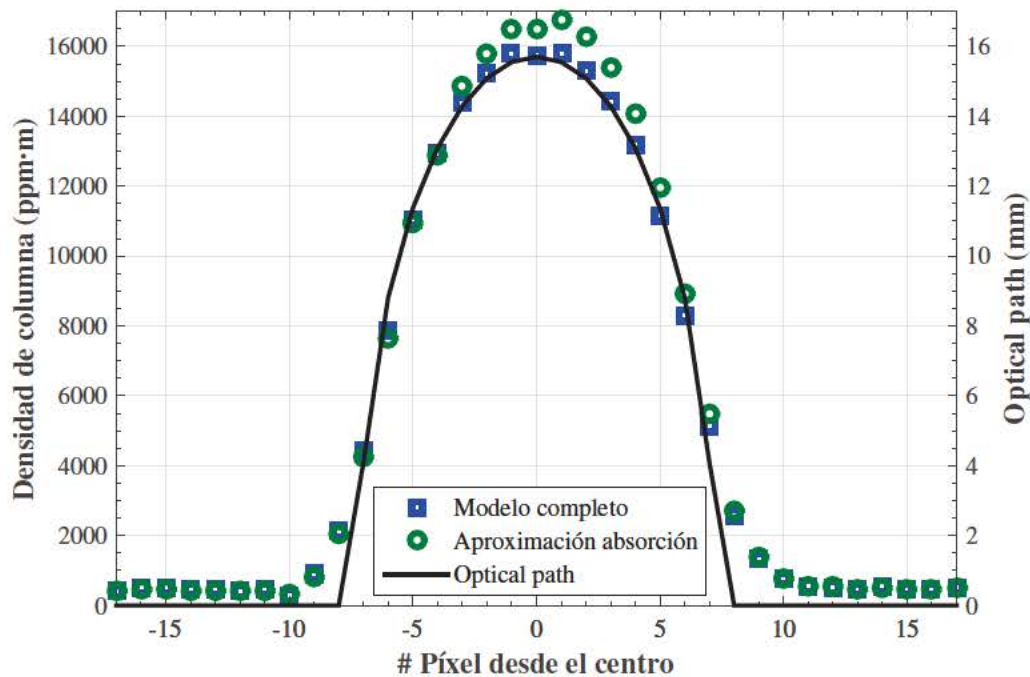


Figura 5.9: Se muestran dos perfiles de densidad de columna recuperados en la salida de la tubería, ambos comparados con el camino óptico estimado para cada píxel. Uno de los perfiles (con marcas en forma de cuadrados) ha sido recuperado mediante el modelo radiométrico completo, que incluye el término de emisión. El segundo de los perfiles (con marcas en forma de círculos) se corresponde con la aproximación de absorción, despreciando los efectos debidos a la propia emisión de la pluma de gases.

incluyen imágenes de ambas variables, densidad de columna Q y temperatura T del gas exhalado por el tubo de cobre. Con la idea de minimizar todo lo posible los tiempos de cómputo, se ha incluido una etapa de pre-clasificación a partir del algoritmo no supervisado k -means, para así excluir del cálculo a aquellos píxeles que no forman parte de la nube de gases (al margen de desechar todos aquellos cuyos valores de transmitancia no sean adecuados, de forma supervisada), y donde, por tanto carezca de sentido el modelo radiométrico descrito. En las figuras 5.10b y 5.10d se han representado perfiles espaciales a distintas alturas correspondientes a las imágenes de Q/T recuperadas, en aquellas filas marcadas con líneas discontinuas; la fila etiquetada con el valor 86 corresponde con los perfiles que se muestran en la figura 5.9.

Los resultados correspondientes a la densidad de columna arrojan un elevado grado de acuerdo con los datos estimados no sólo en las proximidades del tubo, sino que el proceso de disolución que el gas sufre también se aproxima al comportamiento esperado, obteniendo valores máximos cada vez más bajos conforme nos alejamos de la boca de salida. En el caso de la temperatura, llevar a cabo una buena estimación de la precisión asociada a los valores recuperados es una tarea compleja, dado que las medidas proporcionadas por termopares sobre gases están influenciadas por grandes fuentes de incertidumbre y, en cualquier caso, sólo pueden realizar estimaciones en un sólo punto de medida.

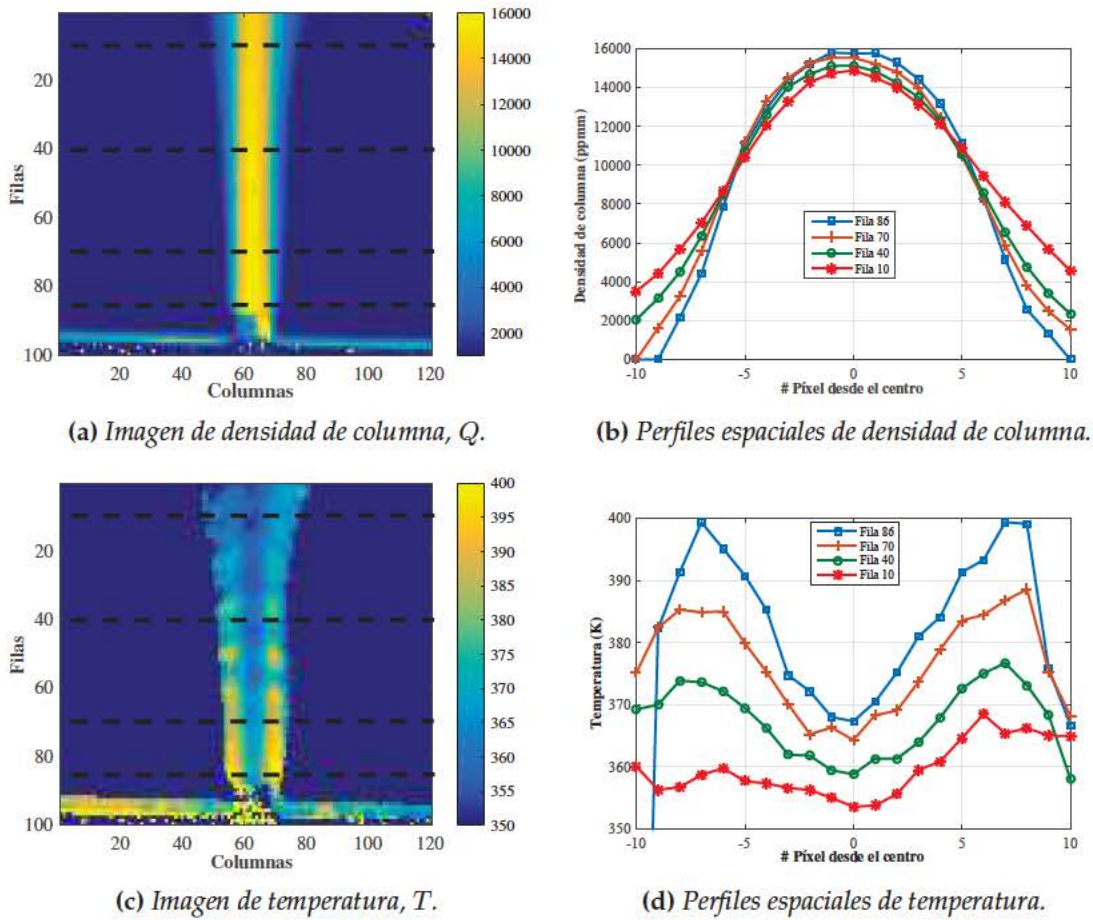


Figura 5.10: Resultados de la recuperación simultánea de los parámetros densidad de columna y temperatura de CO_2 , para las medidas de validación.

Sin considerar esto último, cabe destacar que los perfiles de temperatura horizontales a diferentes alturas mostrados en la figura 5.10d son muy plausibles, dado que contienen una estructura térmica que coincide con la que esperaríamos proporcionase el método de calentamiento empleado, donde las paredes de la tubería son las responsables del calentamiento del flujo de gas, mientras que los valores absolutos también concuerdan con los proporcionados por el termopar, de alrededor de $T = 100^\circ\text{C}$. Además, el acoplamiento entre las variables temperatura y densidad de columna, y sus correspondientes incertidumbres, como analizaremos en la siguientes sección, contribuye a la fiabilidad de los datos de temperatura recuperados, dado que sólo existe un único mínimo bien delimitado al representar el mapa de error, y por lo tanto la precisión obtenida en la estimación de la densidad de columna ha de trasladarse a la precisión de la magnitud temperatura.

La calidad del ajuste también puede apreciarse evaluando directamente los espectros de transmitancia experimental y teórica, como se muestra en la figura 5.11, donde se representan los valores obtenidos para un píxel situado encima del centro del tubo de cobre, en el centro de la nube de gases. Se comprueba como existe una gran similitud entre am-

bos conjuntos de datos, especialmente en la región correspondiente al ajuste, entre 2240 y 2280 cm^{-1} . El error relativo entre la transmitancia experimental y la teórica, definido como $|\tau_g^{sim} - \tau_g^{exp}|/\tau_g^{exp}$, también se ha representado; la gráfica muestra como el error aumenta conforme nos alejamos del ancho de banda de ajuste y la transmitancia alcanza valores próximos a cero, donde la transmitancia experimental presenta unos niveles de ruido mucho más elevados.

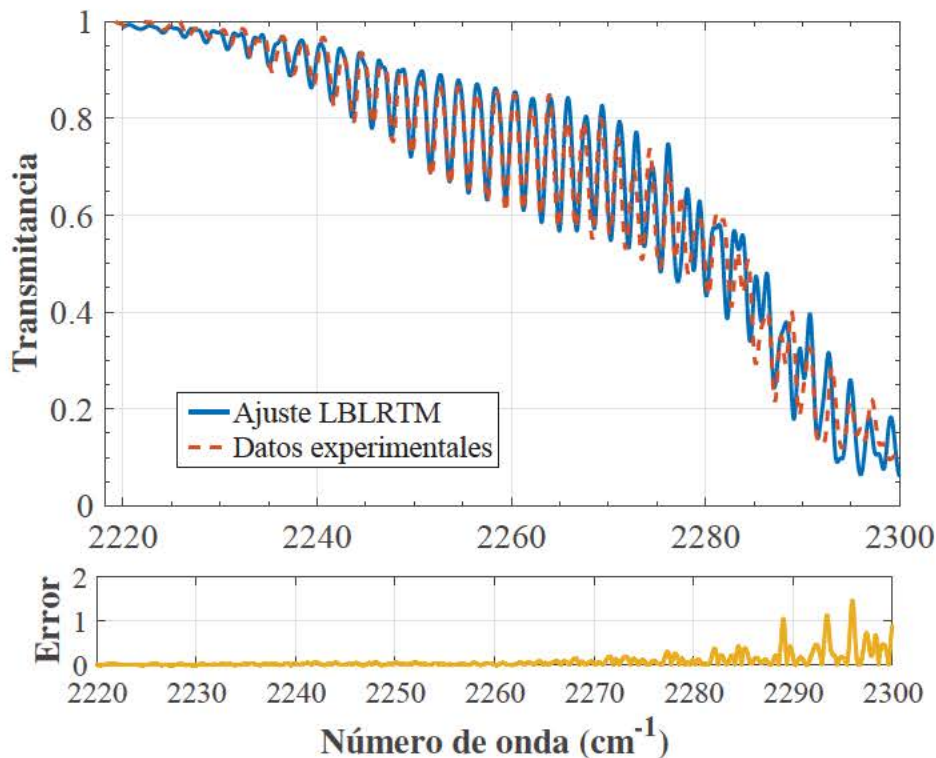


Figura 5.11: Ejemplo de ajuste de la transmitancia experimental mediante el método iterativo propuesto.

5.5.4. Estimación de errores en la recuperación de Q/T

A partir de simulaciones radiométricas, se ha llevado a cabo una estimación de las incertidumbres asociadas a T_g y Q_g en el proceso de ajuste, empleando un rango de potencias de ruido esperables, desde el nivel estimado a partir del espectro medido de referencia, $\mathcal{L}^n \sim 1 \text{ mW/m}^2 \text{ sr}$, hasta un valor un orden de magnitud superior, $10 \cdot \mathcal{L}^n$. Para cada nivel de ruido, 100 simulaciones de espectros de transmitancia generados a partir de valores aleatorios de temperatura y densidad de columna (en un rango que varía entre 200 y 500 K y 4000 y 14000 $\text{ppm} \cdot \text{m}$) han sido construidos empleando los espectros ruidosos en la expresión 5.7. El error medio relativo de los valores recuperados (representados en la figura 5.12) varía entre el 1.6 % y el 1.8 % para el caso de la temperatura, T_g (medido en K), y de entre el 0.2 % y el 0.5 % para Q_g . De forma que podemos concluir que el método de ajuste seleccionado es lo suficiente robusto como para los niveles de ruido habitualmente presentes en nuestras medidas.

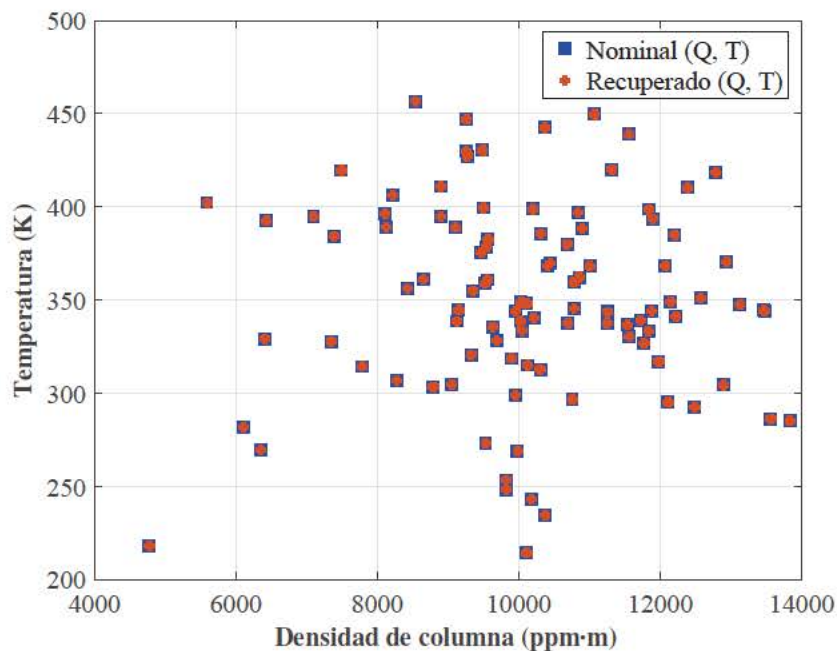


Figura 5.12: Representación del par Q - T correspondiente a los valores simulados junto a los recuperados, para las condiciones de ruido experimental dadas por \mathcal{L}^n .

La figura 5.12 muestra el comportamiento típico de la distribución de valores del SSE, para un píxel en particular y diferentes valores de densidad de columna y temperatura. Es posible comprobar de nuevo la ausencia de mínimos locales y variaciones bruscas, por lo que el proceso de minimización es fácilmente abordado por el algoritmo propuesto en la situación experimental.

5.6. Aplicación: combustiones de vehículos

Después de que podamos considerar como validado el método de medida propuesto a través de los ensayos descritos, emplearemos esta misma metodología en una aplicación real: la medida de la emisiones procedentes de la combustión de un vehículo Diesel, a través de su tubo de escape.

Al igual que en las medidas de validación, se tomaron un total de cuatro interferogramas por cada medida, con un tiempo de adquisición cercano a los 5 minutos. Dada la naturaleza turbulenta de este tipo de fluidos, hubiera sido aconsejable adquirir un mayor número de interferogramas para posteriormente promediarlos, pero no se disponía de un sistema de estabilización que permitiera mantener el régimen de trabajo del motor un tiempo mayor.

En las figuras 5.14 y 5.15 se muestran los mapas de densidad de columna y temperatura para el caso del CO_2 . Al igual que en el caso anterior, el ajuste se llevó a cabo en la región espectral correspondiente a 2240 - 2280 cm^{-1} . En este caso es esperable que obten- gamos un mayor grado de incertidumbre, dado que los espectros medidos presentan una

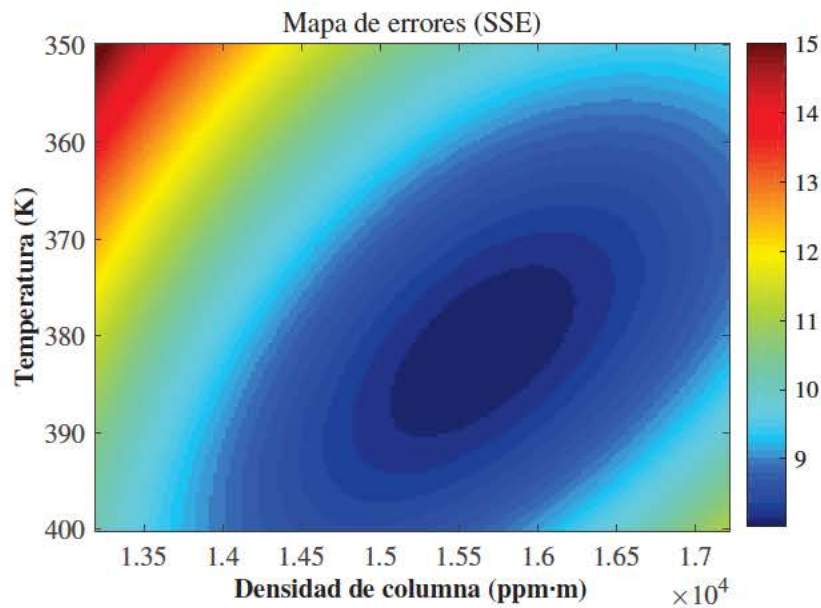


Figura 5.13: Representación de la suma del error cuadrático (SSE) entre $\tau_{sim}^{g,compl}$ y τ_{exp}^g como una función de la densidad de columna y la temperatura en torno a una región próxima a los valores de ajuste. La transmitancia experimental se corresponde con un píxel en el centro de la pluma de gases mostrada en la figura 5.10a; el ajuste se realiza en la región espectral delimitada entre 2240 y 2280 cm^{-1} .

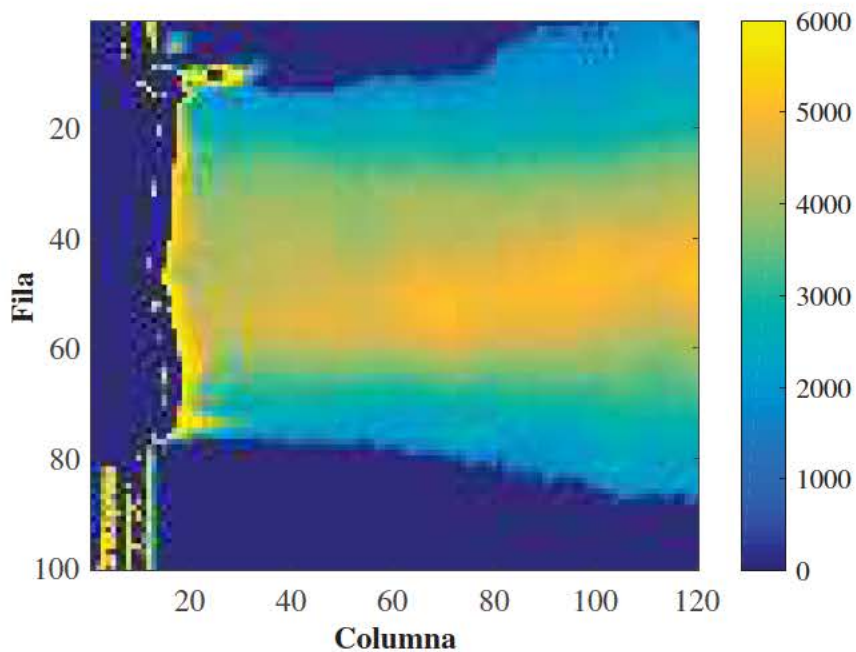


Figura 5.14: Imagen de la densidad de columna de CO_2 recuperada, para las emisiones producidas por un vehículo Diesel.

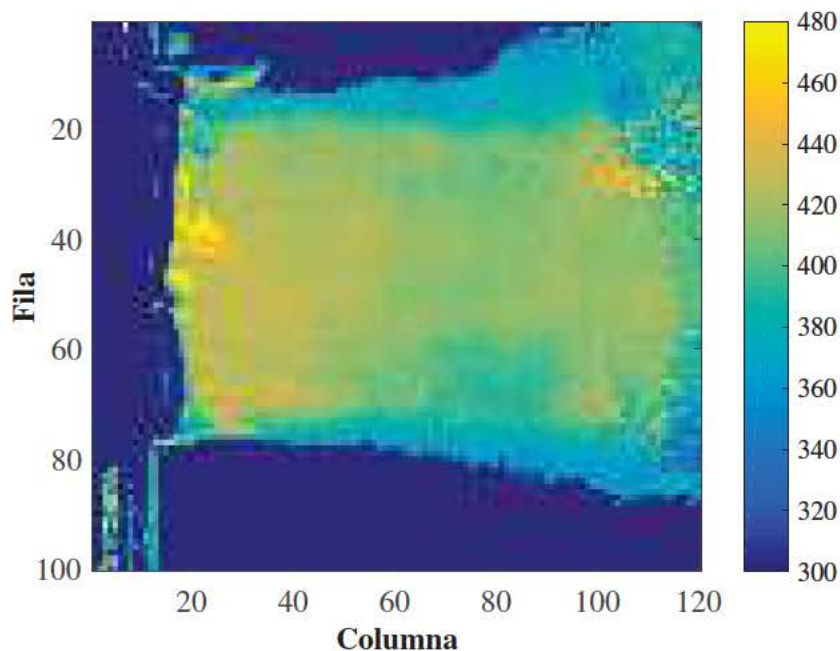


Figura 5.15: Representación del valor de temperatura proporcionado por el ajuste, en las mismas condiciones que la figura anterior.

gran influencia de las turbulencias y son más ruidosos. Sin embargo, y aunque no dispongamos de medidas independientes de Q y T como para estimar los errores producidos, podemos estar razonablemente seguros de que estos también son pequeños, ya que en la sección anterior llevamos a cabo simulaciones con espectros ruidosos que demostraban el grado de robustez del algoritmo implementado, donde un incremento de la potencia de ruido en un orden de magnitud (medida en el ancho espectral de ajuste) sólo ocasiona un error medio en la temperatura entre un 1.6 % y un 1.8 % (medida en K), y para la densidad de columna, entre un 0.2 % y un 0.5 %. Dado que la variabilidad de la pluma de gases durante el periodo de adquisición de nuestro instrumento es muy superior a estos valores, podemos concluir que los errores obtenidos no han de ser significativos teniendo en cuentas las condiciones de la medida.

Al margen del dióxido de carbono, se esperaba la presencia de otros compuestos como el agua, el monóxido de carbono, hidrocarburos e incluso óxidos de nitrógeno, los cuales presentan firma espectral en el infrarrojo medio y podrían haber sido observados. Sin embargo, aunque los píxeles correspondientes al interior de la pluma fueron analizados de forma exhaustiva, revisando todo el ancho de banda disponible, sólo concentraciones de CO_2 y H_2O fueron correctamente identificadas en esta campaña de medidas. De hecho, es también razonable que no hayan sido detectadas otras especies dado que los valores de concentración típicos en motores Diesel de última generación, como el analizado, son bastante bajos; con valores promedios del orden de 0.1 % para el CO , 30 ppmC (*parts per million carbon*) para el total de hidrocarburos y 500 ppm para los óxidos de nitrógeno, los cuales se encuentran por debajo del límite de detección estimado para los espectros

experimentales.

Por otro lado, la metodología propuesta sigue siendo válida para la medida de estas especies si se encontraran presentes con concentraciones lo suficientemente elevadas, tal y como es el caso de vehículos altamente emisores o *high emitters*. Su aplicación podría ser incluso más simple en dichos casos dado que, al contrario de lo que sucede con el CO_2 , son compuestos que no se encuentran en la atmósfera habitual.

5.7. Conclusiones

En este capítulo se ha propuesto un método que permite cuantificar emisiones de compuestos gaseosos por medio de un espectrómetro de imagen basado en transformada de Fourier (IFTS), con el que hemos sido capaces de construir mapas de densidad de columna y temperatura, en casos en los que el modo radiométrico predominante era el activo, con la baja sensibilidad que ellos supone para la estimación de la temperatura. Este método ha sido implementado, puesto a prueba bajo condiciones controladas de laboratorio sobre una fuga de CO_2 y aplicado a las emisiones provenientes de un motor Diesel.

Para aplicar esta metodología, se han llevado a cabo todas las etapas de tratamiento espectral sobre los datos proporcionados por el sistema Telops FIRST-MW que describimos en el capítulo anterior, a fin de obtener los espectros experimentales. Para generar los espectros sintéticos se ha partido de los datos espectroscópicos y se ha modelado radiométricamente la propagación de radiación desde la fuente hasta el detector IR, incluyéndose los efectos instrumentales.

Los espectros resultantes se emplean en la estimación de la transmitancia experimental en aquellos casos en los que la radiancia emitida pueda ser despreciada, aunque este término pueda ser incorporado en caso de requerir de mayor precisión. El uso de ratios conlleva que no sea necesario contar con una calibración radiométrica del equipo de medida, lo que mejora la robustez del método propuesto ya que reduce su sensibilidad a muchos factores de influencia, como la responsividad espectral del detector o la transmitancia atmosférica.

Los ensayos experimentales en condiciones de control han arrojado un alto grado de acuerdo en los resultados, considerando por tanto que nuestra metodología queda validada tanto en términos de la recuperación de densidad de columna como de la temperatura para el caso del CO_2 (con la dificultad añadida que supone su presencia en la atmósfera convencional). Hecho esto, se ha tratado de aplicar a un caso práctico, donde se han obtenido imágenes cuantitativas del nivel de CO_2 emitido por un automóvil.

A modo de conclusión, ha quedado demostrado que la detección activa llevada a cabo con un sistema de imagen hiperespectral puede proveer información cuantitativa acerca de la cantidad de gas y su temperatura, también para el caso de emisiones propias de vehículos, a pesar de que éstas sean relativamente pequeñas y se encuentren a temperaturas inferiores a las de otros trabajos realizados sobre emisiones de chimeneas industriales, en modo pasivo. El método propuesto puede aplicarse a compuestos distintos del CO_2 , sin más que considerar que su firma espectral se encuentre dentro del ancho de banda espectral del instrumento; como es el caso de hidrocarburos, monóxido de carbono, dióxido de azufre y otros muchos de interés industrial y medioambiental.

Aunque los sistemas de imagen hiperespectral de tipo IFTS, pese a su alto grado de aplicabilidad, son todavía demasiado complejos para un uso generalizado fuera del laboratorio. En cambio, sí son de gran utilidad para el diseño de nuevos desarrollos, como aquellos basados en sistemas multiespectrales; y nuevos algoritmos específicos para los gases de interés que pueden llegar a proporcionar imágenes cuantitativas de gases. Otra de las líneas de trabajo que se desprenden de los resultados obtenidos, es la necesidad de abordar un proceso de reducción de la dimensionalidad, dado el excesivo volumen de información que es necesario tratar y la gran cantidad de recursos necesarios, de forma que los procesos de cuantificación sean más simples y ágiles y, en última instancia, permitan su aplicación al estudio de fenómenos en tiempo cuasi-real.

PARTE III:

REDUCCIÓN DE LA COMPLEJIDAD Y USO EFICIENTE DE LA INFORMACIÓN

Reducción de la dimensionalidad y modelos de regresión

Los resultados descritos en la parte anterior, capítulos 4 y 5, suponen el cumplimiento de hitos de gran relevancia dentro de los objetivos enunciados al comienzo de este trabajo. Hasta aquí, hemos validado una estrategia que nos permite cuantificar la densidad de columna de compuestos cuya temperatura es desconocida, siendo ésta también recuperada, resolviendo en lo fundamental el problema de la separabilidad entre ambas magnitudes descrito en el capítulo 2.

Yendo un paso más allá, la validación de la metodología de medida propuesta supone la verificación de una de nuestras hipótesis de trabajo fundamentales y, podría decirse que una de las bases de esta tesis: es posible modelar la señal medida por un interferómetro de imagen y ser capaces de generar espectros teóricos de una forma lo suficientemente ágil y precisa como para permitir su empleo en algoritmos de cuantificación. Esta afirmación sólo ha podido contrastarse tras el análisis del problema físico, y después de un estudio pormenorizado de los principios de medida del espectrómetro de imagen utilizado.

Sin embargo, y pese a que las pruebas realizadas parecen indicar que el núcleo de nuestra metodología es robusto, existen aspectos sobre los que es conveniente que centremos nuestra atención. En este capítulo pondremos el foco en la elevada complejidad, y los consiguientes tiempos de cómputo tan elevados que el algoritmo propuesto presenta. Este inconveniente se acusa en gran medida incluso cuando se pretende aplicar no ya a una imagen completa, sino a pequeñas sub-ventanas más manejables. A pesar de haber abordado un proceso de optimización del código, un ordenador Intel i7 con 4 núcleos y 8 GB de memoria RAM requiere de más de una hora para procesar una imagen de 120×100 píxeles, lo cual nos lleva a buscar posibles alternativas que palién este comportamiento.

Comenzaremos nuestra búsqueda mediante el estudio de estrategias que permitan reducir la alta dimensionalidad implícita en una imagen hiperespectral. Entre ellas, la técnica estadística conocida como *Análisis por Componentes Principales* es un punto de partida natural, no sólo por tratarse de un método clásico de reducción de la dimensionalidad y la multicolinealidad [133], de la que adolecen gran parte de nuestras medidas experimentales, sino también porque, como veremos, supone una contribución al filtrado de ruido. Su aplicación abre las puertas a nuevos planteamientos que permiten afrontar el problema de la cuantificación de forma más eficiente y generalizable, como métodos de regresión basados en redes neuronales o NN (*Neural Networks*) y máquinas de vectores de soporte o SVM (*Support Vector Machines*). Aquí lo que se buscará es una función que, aplicada

al espectro medido, proporcione los valores de Q y T sin tener que hacer una búsqueda iterativa.

6.1. El problema de la alta dimensionalidad

Resulta obvio que los recursos demandados (memoria, capacidad de procesamiento, etc.) siempre aumentarán en la medida en que lo haga el conjunto de variables que estemos manejando, independientemente de la eficiencia de nuestro algoritmo. Sin embargo, esta dificultad inherente puede verse acompañada de perjuicios adicionales. Y es que en muchas ocasiones prácticas suele darse el caso de que, por encima de un cierto número de atributos, características o, digamos, variables de observación, tanto la eficiencia como la calidad de los algoritmos que se aplican disminuye en lugar de aumentar. Esta situación suele aparecer cuando parte de los atributos seleccionados no aporta información relevante desde el punto de vista de nuestro procesado, o bien la posible aportación se encuentra degradada o distorsionada por altos niveles de ruido, llegando a contribuir de forma negativa. Es lo que ha sido llamado “la maldición de la dimensionalidad” por algunos autores como en [7].

Otro de los grandes problemas inducidos por la excesiva dimensionalidad es el detrimento de la capacidad de generalización; esto es, su aplicación a nuevas muestras. Es la tan temida condición de *sobre-entrenamiento* u *overfitting*, donde el algoritmo que pretende recuperar los valores (en nuestro caso, T y Q) se encuentra excesivamente adaptado al conjunto de datos con el que ha sido desarrollado (o entrenado).

Las operaciones para la reducción de la dimensionalidad pueden clasificarse en dos enfoques, la selección de características (o *features*) y la extracción de estas, respectivamente. El primero trata de seleccionar un subconjunto de características, tomadas sin realizar sobre ellas ningún tipo de manipulación, provenientes del conjunto original. Se contemplan distintas estrategias: basadas en filtrado, tests estadísticos; métodos envolventes (en inglés, *wrapper*) que consideran su grado de adecuación al problema (computacionalmente costosos); y métodos intrínsecos o incrustados (*embedding*) [95].

En contraposición, la extracción de características propone usar un nuevo conjunto de atributos o variables, obtenidas mediante transformaciones del conjunto inicial. Esta alternativa es de especial interés cuando el número de variables es muy elevado o bien existe una alta correlación o información redundante entre éstas, llegándose a alcanzar un alto nivel de *multicolinealidad*¹. Ejemplos de técnicas que siguen este enfoque son: el análisis por componentes principales (PCA) [56], ampliamente utilizado en el ámbito del aprendizaje máquina y especialmente indicado para tratar problemas debidos a correlación entre variables; el análisis por componentes independientes (ICA) [121]; aquellas denominadas como *Kernel PCA* [42], y diversos métodos no lineales.

Dadas las características propias de las imágenes hiperespectrales, el trabajo presentado en este capítulo se concentra en el uso de estas últimas técnicas de reducción de dimensionalidad y ruido (*feature extraction*), y, en concreto, mediante lo que se denominan

¹Término que habitualmente se emplea en campos como la econometría o la regresión multivariante, y que indica la existencia de interrelaciones entre variables explicativas de un determinado modelo, lo que puede ocasionar coeficientes de regresión poco estables, de gran variabilidad, e intervalos de confianza más amplios [133].

métodos basados en la selección del sub-espacio de la señal (*signal sub-space*) que presentaremos en la siguiente sección.

6.2. Aplicación en imágenes hiperespectrales

Analicemos ahora la información contenida en los datacubos de cada imagen hiperespectral para el caso típico de teledetección de gases que tratamos en el capítulo anterior, donde cada una de las especies detectadas actúa mediante una firma característica a lo largo de un conjunto de líneas espectrales, todas ellas gobernadas por la ley de Lambert-Beer ($\tau(\nu) = e^{-a(\nu,T)cx}$). Si deseáramos obtener la densidad de columna, conocida la temperatura bastaría con seleccionar una única línea para poder estimarla. Entonces el comportamiento de todas las demás líneas queda determinado, puesto que la firma espectral nos proporciona su intensidad relativa para las distintas longitudes de onda. Este hecho pone de manifiesto la elevada correlación existente entre nuestras variables (números de onda) en términos de la cantidad de gas: la variación de c produce una variación coordinada de τ para todos los valores de ν . En cuanto a la temperatura, su efecto es indirecto, a través de la dependencia en T de a , por lo que el efecto para los distintos números de onda no es tan uniforme. Sin embargo, dista también de ser arbitrario, traduciéndose en general el aumento de T en una mayor amplitud espectral de las bandas de absorción, y en un ensanchamiento de las líneas individuales (ver ejemplo en figura 2.5).

Todo esto nos lleva a considerar que quizás el sistema de representación de la información espectral, codificada en números de onda, no sea óptimo. Esto sugiere, por un lado, que el número de variables que estamos empleando es excesivamente elevado, y, por otro, que un nuevo espacio de dimensión mucho más reducida podría ser capaz de describir de manera más eficiente el comportamiento de los espectros adquiridos.

Pese a que el procedimiento de ajuste descrito en el capítulo 5 está respaldado conceptualmente y ha sido validado y aplicado con éxito, desde el punto de vista de la recuperación de la información física (concentración y temperatura) no constituye la forma más natural de afrontar nuestro problema. Una visión alternativa consiste en considerar a un espectro con K números de onda como un único punto dentro de un espacio de dimensión K , que será denominado *espacio espectral*. Con este planteamiento nuestro escenario radiométrico, en el que a cada par Q y T corresponde un espectro, constituye una función de dos variables (Q y T), tal que $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^K$. Para el caso de una imagen hiperespectral de $M \times N$ componentes, el datacubo correspondiente es una nube de $M \times N$ puntos en dicho espacio. Esto significa que si un único compuesto es observado en nuestro campo de visión, CO_2 por ejemplo, todos los puntos en la nube se dispondrían en torno a una cierta superficie (variedad de dimensión 2) en el espacio espectral, con sólo pequeñas variaciones debidas al ruido. En otras palabras, el conjunto de todos los espectros ideales, para cualesquiera valores de Q y T , está definido por la función $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^K$ y forma un subconjunto bi-dimensional en el espacio espectral. El espectro experimental debería situarse muy cercano a éste, con pequeñas desviaciones debidas al ruido.

Sin embargo, según la metodología seguida en el capítulo 5, el conjunto de datos o espectros que eran procesados, y que pueden considerarse intrínsecamente bi-dimensionales, son descritos por un extenso número de variables, tantas como números de onda conforman el espectro: del orden de miles para una resolución de $0,5 \text{ cm}^{-1}$, lo cual es una

estrategia tremendamente ineficiente.

6.2.1. Proyección en sub-espacios de señal. Análisis por Componentes Principales

Consideremos que la imagen hiperespectral medida (\mathbf{I}) puede modelarse como la suma de un término idealizado (\mathbf{I}_o), correspondiente al espectro de radiación, junto a una componente de ruido experimental (\mathbf{R}), de carácter exclusivamente aditivo:

$$\mathbf{I} = \mathbf{I}_o + \mathbf{R} \quad (6.1)$$

A priori, no impondremos ningún tipo de restricción adicional sobre \mathbf{I} , y reordenaremos la información originariamente tridimensional del datacubo en únicamente dos dimensiones, una espacial formada por todos los píxeles de ambas filas (M) y columnas (N), y una segunda con las componentes espectrales (de dimensión K). Sobre esta matriz de datos $\mathbf{I}_{(M \times N) \times K}$ podemos seguir una estrategia análoga a la empleada por Manolakis en [73], y considerar para cada uno de los espectros de cada píxel un modelo basado en la combinación de sub-espacios lineales, de forma que cada uno de estos (en general, s) pudiera expresarse como:

$$\mathbf{s} = \sum_{i=1}^P c_i \cdot \mathbf{h}_i + \mathbf{e} \equiv \mathbf{H}\mathbf{c} + \mathbf{e} \quad (6.2)$$

donde $P \ll K$, y $\{\mathbf{h}_i\}$ es un sub-conjunto de vectores linealmente independientes de dimensión K , sobre los que se proyecta el espectro original a partir de los coeficientes c_i , \mathbf{H} es la matriz de dimensión $K \times P$ que tiene a los vectores $\{\mathbf{h}_i\}$ por columnas, \mathbf{c} es un vector columna ($P \times 1$), y donde \mathbf{e} representa el error de esta aproximación. Bajo esta formulación, el problema se reduce a encontrar las bases de vectores $\{\mathbf{h}_i\}$ de forma práctica, lo que puede llevarse a cabo a partir de la propia matriz $\mathbf{I}_{(M \times N) \times K}$, mediante técnicas basadas en agrupación automática y algoritmos de extracción de *endmembers* [73]. Sin embargo, y al contrario de lo que sucede en las regiones VIS/NIR o SWIR, la radiancia procedente de las bandas MIR/TIR sufre una gran variabilidad debido fundamentalmente a cambios térmicos, imposibilitando así el uso de muchas de estas técnicas.

Una alternativa para construir los vectores $\{\mathbf{h}_i\}$, muy eficaz cuando tenemos un conjunto de datos multidimensional de baja dimensionalidad intrínseca es usar el *análisis de componentes principales* (en inglés, PCA). Esta técnica estadística genera un nuevo conjunto de ejes ortogonales óptimamente adaptado a los datos de partida, en el sentido de que su origen coincide con el centro de masas de los puntos bajo análisis en el espacio espectral, y están orientados de forma que las proyecciones sobre los diferentes ejes estén incorreladas (esto es, la matriz de covarianza de los datos en los nuevos ejes sea diagonal). Los vectores unitarios correspondientes a estos *ejes principales* son los autovectores de la matriz de covarianza y van a ser nuestra base $\{\mathbf{h}_i\}$. Se obtienen en orden decreciente con respecto al autovalor asociado, esto significa que la primera dirección principal es aquella a lo largo de la cual la varianza de los datos es máxima; la segunda componente principal es, de entre el subconjunto de vectores perpendicular al primero, aquel cuya dirección contiene la varianza mayor, y así sucesivamente. Las coordenadas de un punto en el espacio espectral con respecto a dicha base son denominadas *componentes principales* o CPs, y se

obtienen mediante la sustracción del centro de masas y la posterior proyección sobre la base de autovectores.

La manera más eficiente de encontrar la base de componentes principales para una matriz de datos \mathbf{D} (que en nuestro caso puede ser \mathbf{I} o un determinado sub-conjunto adecuadamente seleccionado) es a través de la *descomposición en valores singulares* (en inglés, SVD), expresándose ésta como $\mathbf{D}^T = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{W}^T$. Se puede demostrar [93] que los vectores columna de la matriz \mathbf{U} son los autovectores de la matriz de covarianza de \mathbf{D} , y los valores singulares (elementos de la diagonal de $\mathbf{\Sigma}$), elevados al cuadrado y divididos por el número de datos (aquí, $M \times N$) son los autovalores.

Sea $\mathbf{I}' = \mathbf{I} - \mathbf{M}$ la matriz de datos centrada (donde \mathbf{M} es una matriz de dimensión $(M \times N) \times K$ en la que todas las columnas son iguales y contienen, en cada elemento, la medida de la correspondiente fila $m_{ij} = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K I_{ij}$). Si proyectamos las filas de \mathbf{I}' sobre el espacio de vectores $\mathbf{H}_{K \times P}$ que generan los K primeros autovectores de la matriz de covarianza (siendo $P \ll K$), el resultado de la proyección, $\mathbf{F}_{(M \times N) \times P}$, vendría dado por:

$$\mathbf{F} = \mathbf{I}'\mathbf{H} = \mathbf{I}'_o\mathbf{H} + \mathbf{R}_p \quad (6.3)$$

donde $\mathbf{I}'_o = \mathbf{I}_o - \mathbf{M}$, y $\mathbf{R}_p = \mathbf{R}\mathbf{H}$ representa la componente de ruido una vez proyectada sobre \mathbf{H} . Esta nueva base de autovectores llevaría a cabo una doble función: por un lado, reduciría la dimensionalidad de nuestros datos, y, por otro, reduciría los niveles de ruido fruto de la eliminación de los autovectores pequeños, que contribuyen con un mayor nivel de ruido que de señal. La idea es que, al estar el sub-espacio \mathbf{H} adaptado a la señal, cuando se proyecta sobre \mathbf{H} ésta permanece prácticamente inalterada, pero se pierde una parte importante del ruido.

Discutiremos ahora qué alternativas tenemos para generar este sub-espacio \mathbf{H} , mediante la selección del sub-conjunto \mathbf{D} , en función del grado de conocimiento que poseamos sobre la composición de nuestra imagen hiperespectral. Para lo que distinguiremos entre:

1. **Caso 1.** Si no contamos con ningún tipo de información o conocimiento adicional sobre la información espectral contenida en la imagen (lo cual puede ser algo razonable en muchos casos) lo más inmediato es la construcción de un sub-espacio adaptado a la totalidad de la imagen, calculando las componentes principales de la matriz de datos completa ($\mathbf{D} = \mathbf{I}$).
2. **Caso 2.** La estrategia anterior puede no ser muy acertada si entre distintos píxeles encontramos un alto grado de disimilitud, fruto de un escenario muy heterogéneo. En ese caso lo mejor sería construir, para cada subconjunto de muestras (píxeles) con un cierto grado de similitud una base de autovectores adaptada. Seleccionaríamos así espacios de representación con un nivel de adaptación mayor que la anterior estrategia. Con esta opción es necesario incluir una etapa de clasificación (supervisada o no) que establezca las regiones de similitud con las que construir los sub-espacios. Para ello podremos recurrir a algoritmos de agrupamiento o *clustering* estándares como es el caso de *k-means* [59, 19].
3. **Caso 3.** Finalmente, también podría darse el caso de que, al margen del grado de heterogeneidad de nuestra imagen, pudiéramos plantear hipótesis acerca del contenido espectral, identificando qué especies están interviniendo, y radiométrico, si

conocemos el modelo de transferencia radiativa subyacente. Esto abriría una vía al pre-cálculo de bases de autovectores a partir de simulaciones teóricas, conocidas las firmas espectrales, cuyo grado de adaptación habría de ser muy elevado y que podrían emplearse para un gran número de imágenes sin necesidad de repetir el proceso de re-calcular los espacios de vectores.

También señalaremos que, a partir de la proyección \mathbf{F} de los espectros originales, podemos recuperar unos espectros “filtrados” en los que el ruido se ha reducido sustancialmente, mediante la proyección inversa:

$$\mathbf{I}_{filt} = \mathbf{F}\mathbf{H}^T + \mathbf{M} \quad (6.4)$$

donde hemos añadido la media \mathbf{M} que previamente se había sustraído.

Tanto en el primero como en el segundo de los casos, las hipótesis de partida son relativamente laxas, y los sub-espacios de señal podrían generarse a partir de los propios datos experimentales, lo que tiene la ventaja de reducir la probabilidad de inducir distorsiones, aunque los niveles de filtrado de ruido se vean también reducidos.

6.2.2. Recuperación de \mathbf{Q} y \mathbf{T} mediante CPs: planteamiento

Dado que la mayor parte de la varianza de los datos se encuentra en la primera componente principal, una buena aproximación al conjunto de datos de partida puede llevarse a cabo considerando sólo un pequeño número de componentes principales, digamos P . Esto sería equivalente a proyectar el conjunto de datos en el sub-espacio P -dimensional construido a partir de los P primeros ejes principales.

En nuestro caso, los datos deberían tener una dimensionalidad próxima a dos, estando todos muy cercanos a una superficie, aunque esta superficie no será un plano, puesto que la transmitancia no es lineal con Q o T . Sin embargo, si el intervalo de variación de T y Q en los datos es relativamente pequeño, la correspondiente región de la superficie será aproximadamente plana, de forma que únicamente dos componentes principales serían suficientes para describir con buena aproximación toda la variabilidad de los datos de partida ($P = 2$). Cuando T y Q tengan una variación más amplia, será necesario tomar $P > 2$, pero, en todo caso, las componentes principales de órdenes mucho mayores contendrán principalmente ruido. En resumen, seleccionar un espacio con las primeras componentes principales no sólo reduce extraordinariamente el volumen de los datos, sino que también se traduce en un filtrado del ruido eficiente [82].

A la vista de las posibilidades que nos plantea el uso de este tipo de estrategias de reducción de la dimensionalidad, es posible sugerir que el algoritmo de ajuste propuesto en el capítulo 5 de esta tesis pueda ser empleado sobre las coordenadas de las componentes principales en lugar de las originales. Para ello, la nueva estrategia consiste en disponer de la base de autovectores calculada de forma previa. Esto supondría un tiempo de cómputo bastante elevado si hubiera de hacerse para cada imagen hiperespectral, pero, por fortuna, no sería necesario. En lugar de esto, hemos obtenido las bases de los autovectores (\mathbf{H}) para un conjunto de datos que denominaremos estándar, y que está formado por espectros teóricos (caso 3 de la sección anterior) en todo el rango de temperaturas y densidades de columna esperable para nuestros experimentos. Estos autovectores serán

empleados para proyectar sobre ellos todos los datos experimentales. Los resultados no sean las componentes principales óptimas en un sentido matemático estricto, dado que la distribución estadística de Q y T en la imagen de la nube de gases no coincidirá con la del conjunto de datos usado, por lo que las denominaremos “CPs aproximadas” o “efectivas”. Aún así este procedimiento resulta enormemente efectivo en términos de reducción de la dimensionalidad de los datos originales.

Escribiremos una matriz con los datos estándar (puramente teóricos), formada por los espectros correspondientes a un rango de variación de Q y T :

$$\begin{bmatrix} (T_0, Q_0) & (T_0, Q_0 + \epsilon_Q) & \cdots & (T_0, Q_N) \\ (T_0 + \epsilon_T, Q_0) & (T_0 + \epsilon_T, Q_0 + \epsilon_Q) & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (T_M, Q_0) & \cdots & \cdots & (T_M, Q_N) \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

$(M \times N)$

donde el conjunto formado por todos los pares (Q, T) puede entenderse como un mapa de estados de la nube de gases, especialmente cuando se disponen en forma matricial, donde cada fila corresponde a un valor de temperatura y cada columna a un valor de la densidad de columna. Denominaremos a esta estructura de datos *mapa Q-T*. Los valores seleccionados han sido: $T_0 = 300 \text{ K}$, $T_M = 450 \text{ K}$, $Q_0 = 1000 \text{ ppm} \cdot m$, $Q_N = 16000 \text{ ppm} \cdot m$, $\epsilon_T = 1 \text{ K}$ y $\epsilon_Q = 15 \text{ ppm} \cdot m$; ya que pretendemos aplicar este planteamiento a las medidas de validación del capítulo 5. Cada punto de coordenadas (Q, T) en el mapa se corresponde con un espectro de transmitancia (la expresión del conjunto de datos en el espacio espectral en las bases originales formadas por los números de onda). Los valores de sus componentes principales definen un nuevo espectro (la expresión del conjunto de datos en la base de autovectores principales), del que nos quedaremos con una versión reducida conservando sólo un pequeño número de P componentes (en general, $P < 10$).

Tras esta operación de cambio de base, el algoritmo de ajuste es ahora mucho más sencillo. Para cada píxel que estemos procesando, previamente se calcula su versión de dimensionalidad reducida proyectando sobre los P primeros autovectores de nuestro conjunto de datos estándar (CPs efectivas), y se compara con los espectros reducidos del mapa $Q-T$, de forma que se le asigne aquel punto que presente el mínimo error cuadrático.

Esta alternativa reduce de forma drástica el tiempo de cómputo, dado que todas las operaciones con más demanda de recursos de cálculo se llevan a cabo una única vez para todos los píxeles de la imagen, incluyendo el cálculo de los espectros teóricos (con su correspondiente ensanchado instrumental mediante la convolución con la función ILS) para cada punto del mapa $Q-T$, y la obtención de los autovectores. En realidad, no sería incluso necesario emplear un algoritmo sofisticado de búsqueda, dado que el cálculo del error cuadrático entre dos vectores de 10 o menos componentes es extremadamente rápido, simplemente podemos calcularlo para todos los puntos del mapa y quedarnos con el mínimo valor.

6.2.3. Recuperación de Q y T mediante CPs: resultados

Con el objetivo de evaluar las prestaciones de esta metodología de recuperación de datos, volveremos a considerar el experimento de validación que empleamos en el capítulo

anterior, cuando pretendíamos comprobar la validez del método de ajuste iterativo propuesto. En aquel caso, una fuga controlada de CO_2 al 100 % y aproximadamente $100^\circ C$ era situada frente la emisión de un cuerpo negro a $350^\circ C$, de forma que el modo predominante es el de absorción, motivo por el que nuestro análisis partía del cálculo de transmitancias experimentales. Sin embargo, comprobábamos como el acuerdo con los valores esperados (el camino óptico en la boca del tubo) mejoraba sensiblemente al introducir los términos correspondientes a la propia emisión del gas, y el proceso iterativo trataba de emular el modelo radiométrico sintetizado en la ecuación 5.7 a través de:

$$\tau_{g,compl}^{sim}(\nu) \approx \tau_{g,abs}^{sim}(\nu) + \frac{\int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}_{CN}(\nu', T_g) \cdot (1 - \tau_g(\nu')) \tau_a(\nu') \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'}{\int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}_{CN}(\nu', T_b) \varepsilon_b \tau_a(\nu') \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'}$$

donde $\tau_{g,abs}^{sim}(\nu)$ representaba la aproximación de la transmitancia correspondiente al modo de absorción, dada por:

$$\tau_{g,abs}^{sim}(\nu) \approx \frac{\int_{\langle BW \rangle} \tau_a(\nu') \cdot \tau_g(\nu') \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'}{\int_{\langle BW \rangle} \tau_a(\nu') \cdot ILS(\nu - \nu') d\nu'}$$

En lugar de iterar para minimizar el error entre la transmitancia experimental y la expresión 5.7, emplearemos el modelo radiométrico para generar el sub-conjunto \mathbf{D} , sobre el que se estimarán las bases de autovectores $\{\mathbf{h}_i\}$ mediante SVD, y que está determinado por las transmitancias $\tau_{g,compl}^{sim}(\nu)$ en el rango esperado de variación de T y Q .

Una de las estrategias para seleccionar de un modo más conveniente el número P de componentes principales consiste en atender a la distribución de los autovalores. En la figura 6.1 puede comprobarse como los dos primeros autovalores son mucho mayores que los demás, dando cuenta de aproximadamente un 99,5 % de la varianza total, lo que puede llevarnos a considerar que el análisis por componentes principales ha logrado extraer la dimensionalidad implícita del cubo de datos, idealmente igual a 2.

Pese a que el datacubo es el resultado de la variabilidad conjunta de dos parámetros (concentración y temperatura), el primero de los autovalores tiene una fuerte preponderancia. Lo cual es, a todas luces, lógico, puesto que emula un modelo radiométrico con un claro predominio del modo de absorción y, por tanto, la incidencia de la variación de la cantidad de gas presenta un enorme impacto en comparación con aquella producida por alteraciones de la temperatura. Por otro lado, puede resultar útil representar la información contenida en los coeficientes de las componentes principales en función de un único parámetro, temperatura o cantidad de gas, para un valor constante del parámetro restante. De esta forma ha sido generada la figura 6.2 en la que se representan las 5 primeras componentes principales y en cuyo caso se ha seleccionado un valor constante de temperatura igual a 350 K y, de forma alternativa, una cantidad de gas representativa, igual a $8000\text{ ppm} \cdot m$. En ambas representaciones cabe resaltar la dependencia no lineal que se observa en ambos parámetros, aunque este hecho es especialmente notorio en el caso de la temperatura. Además, en este último caso es llamativo el mayor número de

componentes principales con pesos significativos, y que son requeridas para modelar el comportamiento inducido por cambios térmicos.

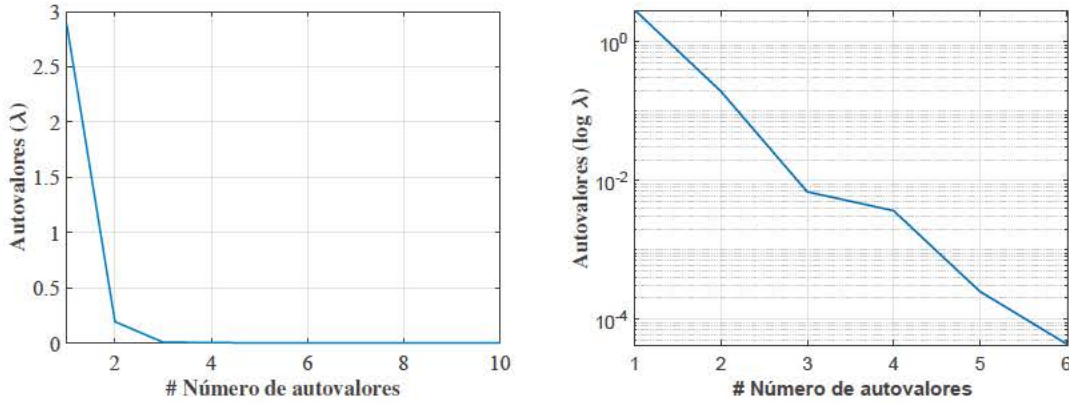


Figura 6.1: Representación de los autovalores correspondientes a los P primeros autovalores, en unidades naturales (a la izquierda) y en unidades logarítmicas (a la derecha).

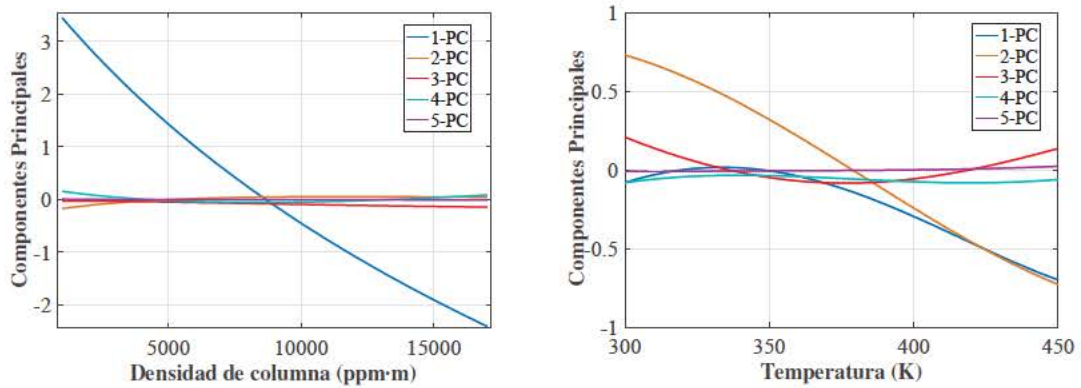


Figura 6.2: A la izquierda, variación de las primeras 5 componentes principales en función de la densidad de columna, para un valor de temperatura constante e igual a 350 K. A la derecha, variación de las primeras 5 componentes principales en función de la temperatura, en este caso para un valor de densidad de columna de 8000 ppm · m.

Cuando nos restringimos a tomar $P = 5$ componentes principales, los resultados de la recuperación de la densidad de columna y temperatura son prácticamente indistinguibles de aquellos obtenidos mediante el método de ajuste iterativo anteriormente empleado, tal y como se muestra en las figuras 6.3 y 6.4.

Para facilitar la comparación, representaremos estos últimos resultados frente a aquellos obtenidos mediante el método de ajuste radiométrico iterativo, y que ya han sido validados de forma empírica. Hemos recurrido a la representación mediante dispersogramas aplicados al conjunto de píxeles pertenecientes al volumen de gases calientes exhalados por la tubería, para lo que previamente hemos llevado a cabo una clasificación no supervisada del escenario mediante el algoritmo *k-means*. De esta forma evitamos, en la

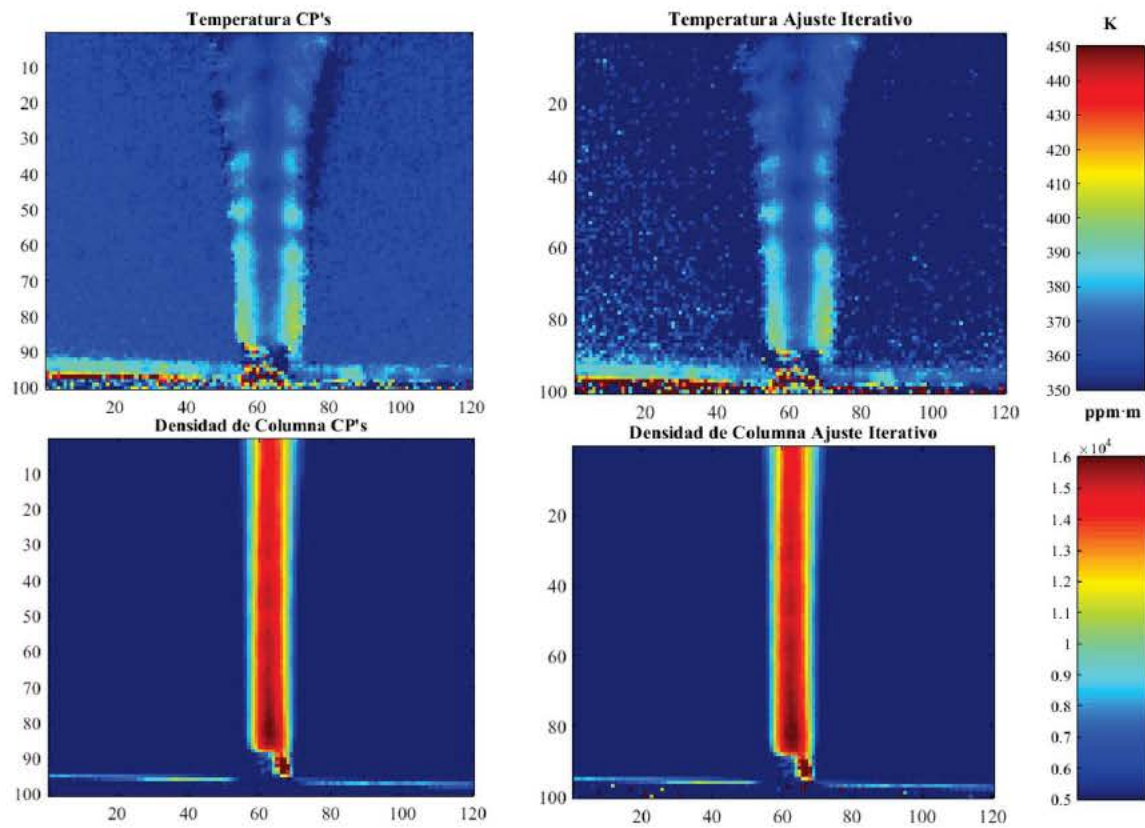


Figura 6.3: Mapas de temperatura y densidad de columna tras aplicar ambos métodos sobre los datacubos correspondientes a las medidas de validación descritas en el capítulo 5.

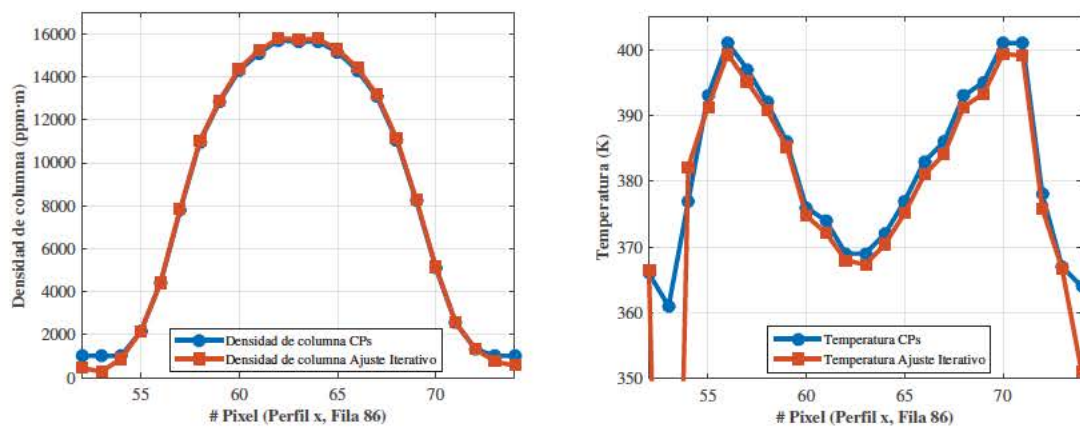


Figura 6.4: Comparación de perfiles horizontales sobre la boca del tubo (fila 86 en la imagen) tras el proceso de recuperación de datos con ambos métodos. A la izquierda, comparación de los resultados para la densidad de columna, y a la derecha para la temperatura.

medida de lo posible, que píxeles correspondientes al fondo se estén incluyendo en la intercomparación. Un ejemplo de este procedimiento se muestra en las gráficas de la figura 6.5, en las que se comparan los resultados obtenidos mediante búsqueda en el espacio de componentes principales junto a los valores obtenidos por ajuste iterativo, validados empíricamente. Fruto de esta comparación se obtiene un error medio en la variable temperatura de $5,3^{\circ}\text{C}$, y $319,3\text{ ppm} \cdot \text{m}$ en la densidad de columna.

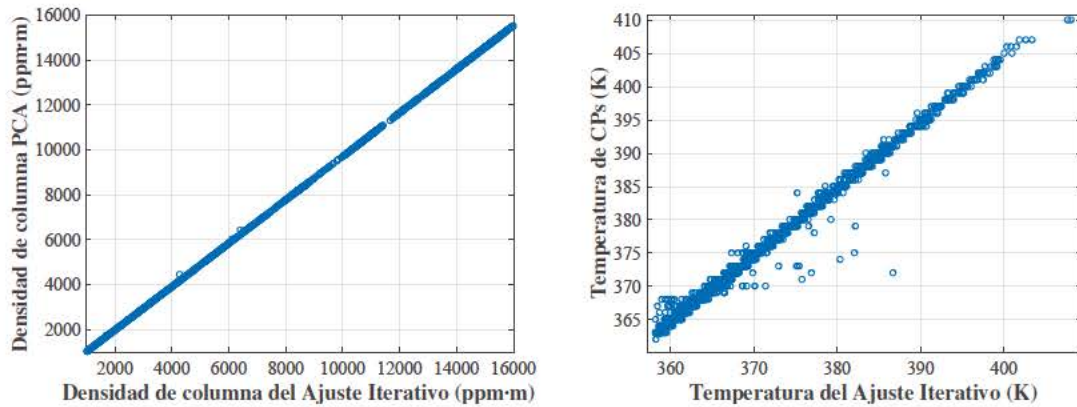


Figura 6.5: Dispersograma de la densidad de columna (izquierda) y de la temperatura (derecha) estimadas por la metodología basada en componentes principales con respecto a los resultados obtenidos con el método de ajuste iterativo, obteniéndose sendos coeficientes de determinación $R^2 = 0,99985$ y $R^2 = 0,98477$, respectivamente para densidad de columna y temperatura.

La primera ventaja que encontramos al emplear esta metodología es el **notable descenso** de los **tiempos de computación**, ya que, aún incluyendo tareas como la generación de los datacubos teóricos responsables de la mayor parte de la complejidad, la duración total empleada en las pruebas realizadas, en el mismo equipo al que aludíamos al comienzo del capítulo, es del orden de pocos minutos. Este tiempo se reduciría aún en mayor medida, hasta alcanzar el orden de segundos, si partiésemos de las bases de autovectores ya generadas, las cuales pueden ser reutilizadas en aquellas series de medidas experimentales que compartan condiciones similares. Frente al arduo proceso iterativo que proponíamos en el capítulo anterior, y que requería de más de una hora de trabajo para estas mismas pruebas, se comprueba el impacto que la reducción de la dimensionalidad ha supuesto en las tareas de cuantificación.

Por otro lado, y pese al buen grado de acuerdo obtenido frente al método anterior, uno de los principales inconvenientes de esta nueva aproximación es que la resolución con la que pueden ser recuperados los parámetros está limitada por la densidad del muestreo con el que se ha construido el datacubo. En el dispersograma correspondiente a la recuperación de la temperatura, en la figura 6.5, es posible apreciar este efecto, que se traduce en la aparición de discontinuidades entre valores próximos, lo que da a la gráfica un aspecto escalonado.

Idealmente, dicho muestreo habría de seleccionarse de forma que no fuera el factor limitante en la resolución del equipo para la medida de T y Q . Esto puede desembocar en la necesidad de emplear estructuras de datos de tamaño considerable, y un efecto análogo se produce al extender el rango de variación de las magnitudes de interés. Concluimos

que pese a suponer un gran ahorro computacional, esta estrategia de recuperación de datos peca de ser poco generalizable ya que sólo nos permitiría abordar de forma adecuada problemas donde la inversión de parámetros se realice en entornos de variación relativamente acotados.

6.3. En busca de la generalización. Aproximación de funciones y regresión

El análisis mediante componentes principales nos ha proporcionado una etapa de reducción de ruido, de la dimensionalidad y de la multicolinealidad. Sin embargo, el algoritmo de recuperación de datos anterior, donde tras la operación de cambio de base sólo es posible realizar la comparación con aquellos valores pre-calculados, puede considerarse falto de una adecuada capacidad de generalización. Con el fin de aportar una solución en este aspecto, a lo largo de esta sección estudiaremos diferentes estrategias que, tomando como fuente aquellos datos proporcionados por la proyección en componentes principales, recojan la dependencia con Q y T en un modelo extensible a nuevas muestras.

Comenzaremos estudiando la mejor forma de aproximar la información contenida en el espacio de componentes principales, y para ello recurriremos a una arquitectura basada en redes neuronales. Más en concreto, haremos uso de funciones de tipo perceptrón, para, en base al *teorema de aproximación universal*, proponer un modelo de red multicapa capaz de sintetizar el comportamiento radiométrico de nuestro problema. Por otro lado, también existe la posibilidad de considerar un modelo de regresión (en general, no lineal), para lo que exploraremos dos alternativas: una de ellas igualmente basada en redes neuronales, GRNN (*Generalized Regression Neural Network*); y una segunda basada en máquinas de vectores de soporte, ε -SVR (*Support Vector Regression*).

6.3.1. Redes Neuronales para aproximación de funciones

Una arquitectura de perceptrón multicapa, unida a un algoritmo de entrenamiento basado en propagación hacia atrás (*back-propagation*), supone una alternativa práctica que permite aproximar relaciones de correspondencia no lineales entre espacios de distinta naturaleza dimensional; concretamente, entre el espacio de las variables observadas (*input*) y el espacio de atributos de salida (*output* o *feature space*). En este caso, el número de neuronas correspondientes a la primera y última capa queda determinado por la dimensionalidad de cada espacio, y sólo habría que considerar cuál es el número de neuronas necesarias en la capa oculta [42].

El *teorema de aproximación universal* [51] establece que una red neuronal del tipo perceptrón multicapa con una sólo capa oculta ha de ser suficiente como para construir una aproximación uniforme a un conjunto dado de datos de entrenamiento (lo que puede entenderse como una generalización del *teorema de Weierstrass* [135], según el cual toda función continua en un intervalo cerrado de ejes reales puede ser expresada mediante series de polinomios uniforme y absolutamente convergentes). Estos postulados garantizan la existencia de un perceptrón multicapa que consistentemente entrenado aproxime nuestros datos de entrenamiento, sin que esto implique que dicha alternativa sea la más viable en términos de tiempos de entrenamiento o generalización en su comportamiento [42].

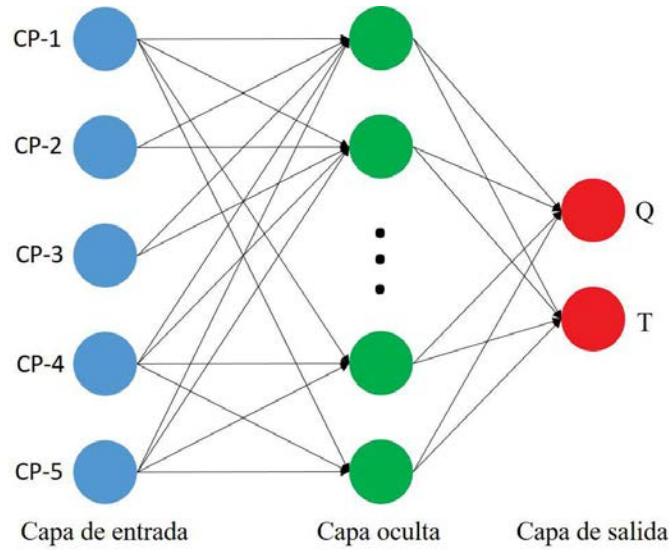


Figura 6.6: Ejemplo de arquitectura de red basada en un perceptrón multicapa, con un número variable de neuronas en la capa oculta, para la aproximación de T y Q mediante las $P = 5$ primeras componentes principales

Sin embargo, y dado el potencial de esta técnica, será nuestra primera opción para aproximar el sub-espacio de componentes principales ($P = 5$) en función de la variabilidad de temperatura T y densidad de columna Q empleados en la sección anterior. Partiremos de la implementación disponible en el entorno de desarrollo MatLab, donde dispondremos de una gran variedad de arquitecturas de red y algoritmos de entrenamiento.

En la figura 6.6 se muestra la arquitectura de red seleccionada, un perceptrón multicapa cuyo número de neuronas en la capa oculta está todavía por determinar, y que toma como entradas los valores de las $P = 5$ componentes principales resultantes de proyectar el espectro medido sobre la base de autovectores determinada por la descomposición en valores singulares (SVD) del mapa $Q - T$. La salida son las dos neuronas que constituyen la capa final y proporcionan una estimación de ambos valores, \hat{Q} y \hat{T} , por lo que una sola arquitectura de red será empleada para la aproximación simultánea de temperatura y densidad de columna.

La estrategia de entrenamiento estará basada exclusivamente en datos provenientes de simulaciones, seleccionados de forma aleatoria dentro del mapa $Q - T$ de componentes principales teóricas. De ese total, el 70 % será empleado en el proceso de propagación de errores, un 15 % se empleará en los procesos de validación y el otro 15 % restante en la ejecución de tests. Como algoritmo de entrenamiento hemos convenido en emplear el algoritmo de Levenberg-Marquardt [80], dentro de la familia de técnicas de aprendizaje con propagación hacia atrás.

Sólo restan por seleccionar dos parámetros: el número de neuronas que componen la capa oculta, para lo que partiremos de un número relativamente pequeño de neuronas ($N = 3$); y el número de datos empleados en el entrenamiento, debido a la repercusión que esto supone tanto en el tiempo de entrenamiento como en la especificidad de la aproxima-

ción lograda, que puede desembocar en el *sobreentrenamiento* de la red. Dada la ausencia de criterios reglados para la determinación de ambos factores, seguiremos una estrategia de prueba y error, en la que realizaremos diferentes procesos de entrenamiento con un número M de patrones que varía desde unos pocos pares de entrada hasta la totalidad del mapa $Q - T$.

Tras el proceso de entrenamiento, las prestaciones fueron evaluadas utilizando el conjunto de espectros empleados en el proceso de validación de la metodología de ajuste iterativo del capítulo 5, al igual que en el caso anterior, para así poder detectar problemas debidos a la falta de generalización de la red construida cuando ésta es alimentada con espectros experimentales (o, mejor dicho, sus componentes principales efectivas), frente a las simulaciones teóricas que fueron empleadas en el proceso de entrenamiento.

Los principales inconvenientes han sido detectados en la estimación de la temperatura. El valor de la densidad de columna es razonablemente bien estimado con prácticamente cualquier configuración de las evaluadas, pero se ha necesitado un número de $N = 10$ neuronas en la capa oculta para alcanzar sensibilidad suficiente en la variable temperatura. Para el volumen de datos analizado, no se han encontrado problemas relativos a la especificidad de la red, aunque sí un aumento considerable de los tiempos de convergencia en las etapas de entrenamiento.

En las gráficas de la figura 6.7 se han representado los resultados obtenidos, para una configuración de $N = 10$ neuronas en la capa oculta y 2000 pares de entrenamiento, frente a aquellos proporcionados por el método de ajuste iterativo del capítulo 5. Si consideramos estos datos a modo de referencia, el error medio obtenido en la temperatura es de $5,9^{\circ}\text{C}$, y el de la densidad de columna $346,2 \text{ ppm} \cdot \text{m}$.

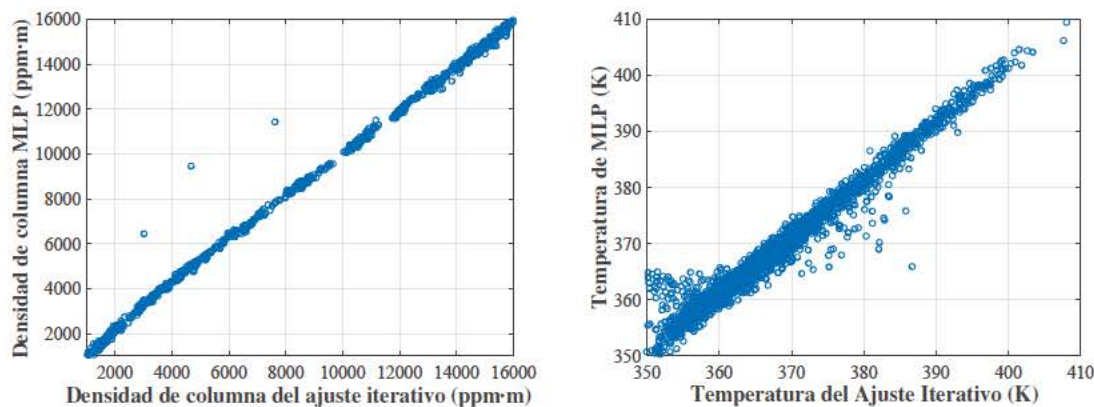


Figura 6.7: Dispersogramas para la comparación de los resultados proporcionados por la arquitectura de red MLP frente al método de ajuste iterativo. A la izquierda, comparación de la densidad de columna, y a la derecha de la temperatura, obteniéndose los coeficientes de determinación $R^2 = 0,99701$ y $R^2 = 0,94836$, respectivamente.

6.3.2. Regresión no lineal múltiple

En términos conceptuales, la idea que prevalece detrás de la regresión no lineal es equivalente a la del caso lineal, en el sentido de que ambas buscan relacionar una o varias

variables respuesta con las variables predictivas o entradas del modelo. Tanto el planteamiento anterior (perceptrón multicapa) como los métodos basados en regresión pueden considerarse casos particulares del problema genérico de aproximación de funciones.

De entre las diferentes técnicas que proveen soluciones al problema de encontrar modelos de regresión no lineales, centraremos nuestra atención en dos familias bien diferenciadas: la primera de ellas basada en redes neuronales artificiales (ANN), a partir de un modelo de regresión probabilístico; y la segunda en el uso de máquinas de vectores de soporte (SVM).

6.3.2.1. Regresión mediante Redes Neuronales (GRNN)

En el año 1991 Donald F. Specht [119] comenzó el desarrollo de este tipo de redes neuronales mediante la formulación de un modelo genérico de regresión para la media de una variable aleatoria y , de carácter escalar, condicionada al valor de una variable aleatoria \mathbf{x} de tipo vectorial. La estimación de y puede expresarse en términos de $\hat{y}(\mathbf{x}) = E[y|\mathbf{x}]$, que da lugar a:

$$E[y|\mathbf{x}] = \int_{-\infty}^{\infty} y \cdot p(y|\mathbf{x}) dy \quad (6.6)$$

Haciendo uso del teorema de Bayes (ecuación 6.7), encargado de proporcionar la relación entre la distribución de probabilidad condicionada, $p(y|\mathbf{x})$, y la distribución de probabilidad condicionada alternativa, $p(\mathbf{x}|y)$, esto es:

$$p(y|\mathbf{x})p(\mathbf{x}) = p(y) \cdot p(\mathbf{x}|y) \quad (6.7)$$

Conocidas las probabilidades *a priori*, podemos desarrollar la ecuación anterior hasta expresarla en términos de la distribución de probabilidad conjunta $p(\mathbf{x}, y) = p(\mathbf{x}|y) \cdot p(y)$:

$$E[y|\mathbf{x}] = \int_{-\infty}^{\infty} y \cdot p(y|\mathbf{x}) dy = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y \cdot p(\mathbf{x}, y)}{p(\mathbf{x})} dy = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} y \cdot p(\mathbf{x}, y) dy}{\int_{-\infty}^{\infty} p(\mathbf{x}, y) dy} \quad (6.8)$$

Si la función de distribución conjunta $p(\mathbf{x}, y)$ no es conocida de antemano, como es habitual en la práctica, una posible alternativa consiste en que ésta sea estimada *a posteriori* a partir de observaciones. Ello puede conseguirse mediante estrategias que no realicen ninguna asunción sobre dicha distribución o requieran de conocimiento previo alguno o bien alternativas semi-paramétricas que introducen ciertas condiciones de contorno.

La propuesta de Specht fue llevar a cabo esta estimación a partir de un modelo no paramétrico basado en la técnica conocida como *Kernel Density Estimator*, seleccionando un *kernel* u estimador de tipo Parzen [19]. Dicha metodología es lo que pasaría a conocerse como *General Regression Neural Network* o, de forma abreviada, GRNN, la cual se encuentra íntimamente relacionada con las denominadas redes neuronales probabilísticas [118], y que puede sintetizarse en la siguiente expresión para la estimación de y :

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = E[y|\mathbf{x}] = \frac{\sum_{i=1}^L y_i \cdot e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)^T \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)}{2\sigma^2}}}{\sum_{i=1}^L e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)^T \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)}{2\sigma^2}}} \quad (6.9)$$

Donde σ constituye el parámetro de suavizado o también llamado *spread*, el cual es el único parámetro configurable de esta tipología de red previo al proceso de entrenamiento; y L el número de pares de entrenamiento. Valores de σ elevados conllevan que los valores estimados estén influidos por un gran número de patrones de entrenamiento próximos, por lo que las predicciones realizadas tendrán un comportamiento más suave. Por ello, la elección del parámetro σ representa la relación de compromiso existente entre la suavidad de las predicciones y el error obtenido por éstas.

Specht sugería el método de *holdout* [119] como estrategia para la selección óptima de este parámetro. Pero, este método sólo parece funcionar cuando los valores de σ_{spread} son muy bajos, por lo que optaremos por seguir una metodología basada en la validación cruzada cuyos resultados se muestran en la figura 6.8.

Por otra parte, la red GRNN, a través de la expresión 6.9, puede implementarse según la arquitectura de red que se muestra en la figura 6.9, mediante funciones de base radial (RBF). En nuestro caso hemos utilizado las funciones disponibles en el entorno de desarrollo MatLab.

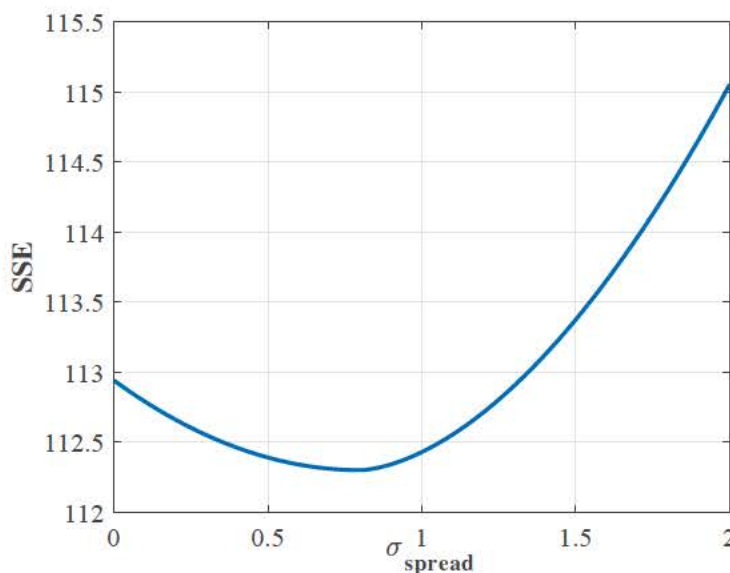


Figura 6.8: Representación de la suma del error cuadrático (SSE) resultado de las pruebas de validación cruzada para la estimación del parámetro σ_{spread} .

Una de las principales ventajas de este tipo de red es su fácil configuración, que se limita al factor σ_{spread} , y cuya repercusión no resulta tan determinante como la selección del número de neuronas de la capa oculta del caso anterior. Además, el proceso de entrenamiento es cuasi instantáneo, ya que tiene lugar en un sólo paso, y de gran robustez, puesto que se garantiza que alcance una solución global en la estimación de los parámetros internos.

Frente a la aproximación basada en un perceptrón multicapa, este tipo de redes requiere de una mayor memoria para el almacenamiento de datos internos, lo que puede suponer una desventaja en sistemas con recursos limitados.

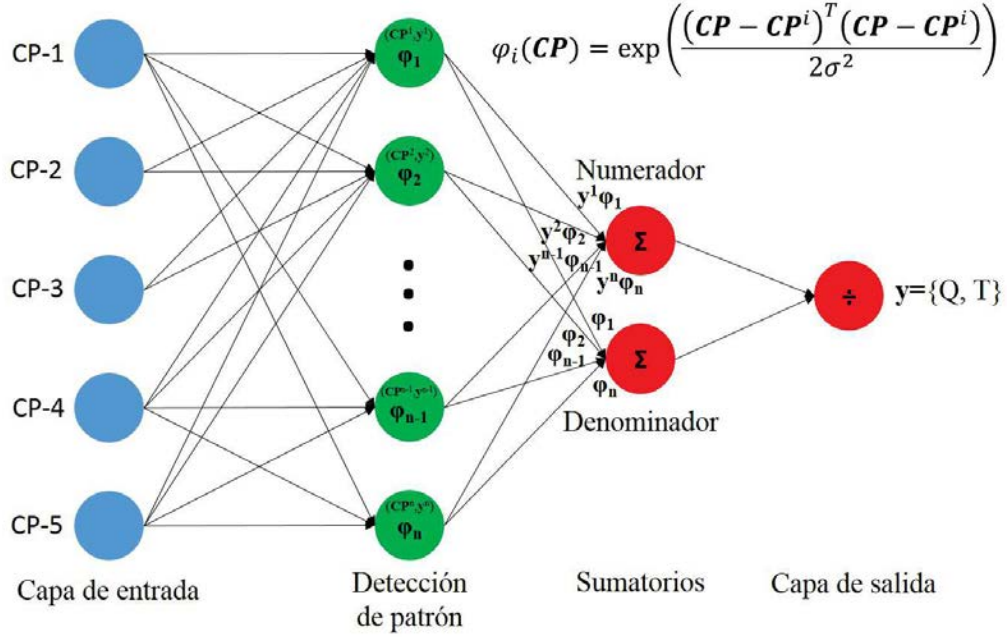


Figura 6.9: Arquitectura para la implementación de la red Generalized Regression Neural Network (GRNN).

Al igual que hicimos en los casos anteriores, se han comparado los resultados obtenidos por el método de ajuste iterativo frente al caso que nos ocupa, mediante GRNN. En las gráficas de la figura 6.10 se han representado los resultados para una configuración de $\sigma_{spread} = 0,8$ y 2000 pares de entrenamiento equidistribuidos, frente a aquellos proporcionados por el método de ajuste iterativo del capítulo 5. Si consideramos estos datos a modo de referencia, el error medio obtenido en la temperatura es de $2,8^\circ C$, frente a los $151,3 ppm \cdot m$ de la densidad de columna.

6.3.3. Regresión mediante Vectores de Soporte (SVR)

La siguiente alternativa que abordaremos se basará en el uso de Máquinas de Vectores de Soporte, del inglés *Support Vector Machine*, o SVM. A modo de breve reseña histórica, esta técnica fue desarrollada por Vapnik en los Laboratorios Bell, precedida por los trabajos del propio Vapnik en la década de los 60, y empleada ampliamente en problemas de clasificación, aunque posteriormente se adaptó para su uso como regresor no lineal. En sus inicios, las máquinas de vectores de soporte fueron extensivamente usadas en el campo del reconocimiento de patrones (*pattern recognition*) [111]. En este caso el principal objetivo es encontrar cotas de decisión para su uso en la obtención de clasificadores, esto es, establecer la pertenencia o no a una determinada clase, que en gran parte de los casos presenta un resultado binario ± 1 . Por ello, para su extensión a problemas de regresión es necesario generalizar este planteamiento, motivo por el cual Vapnik introdujo el uso de funciones denominadas ε -insensitive loss function, caracterizadas por la ecuación 6.10 y ejemplificadas en la figura 6.11.

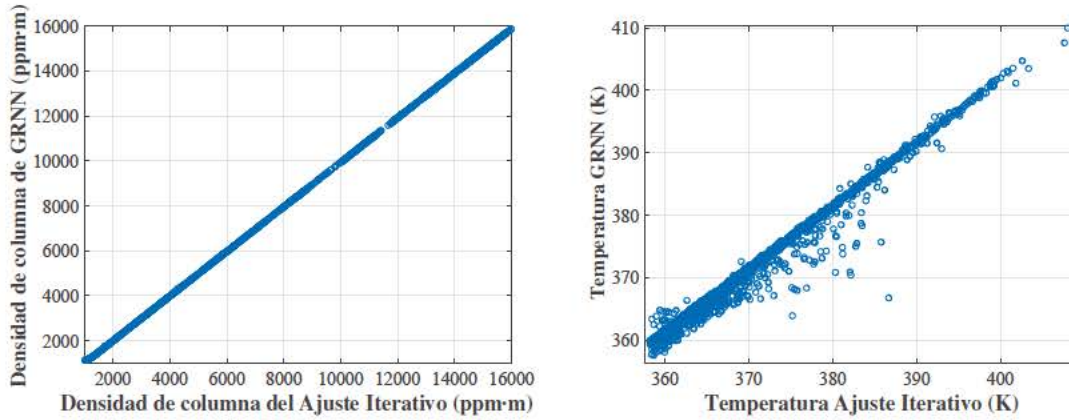


Figura 6.10: Gráficas comparativas de la estimación de densidad de columna y la temperatura proporcionadas por la red GRNN frente al método iterativo, obteniéndose los respectivos valores del coeficiente de determinación, $R^2 = 0,999845$ y $R^2 = 0,9857$.

$$|y - f(x)|_\varepsilon = \max\{0, |y - f(x)| - \varepsilon\} \quad (6.10)$$

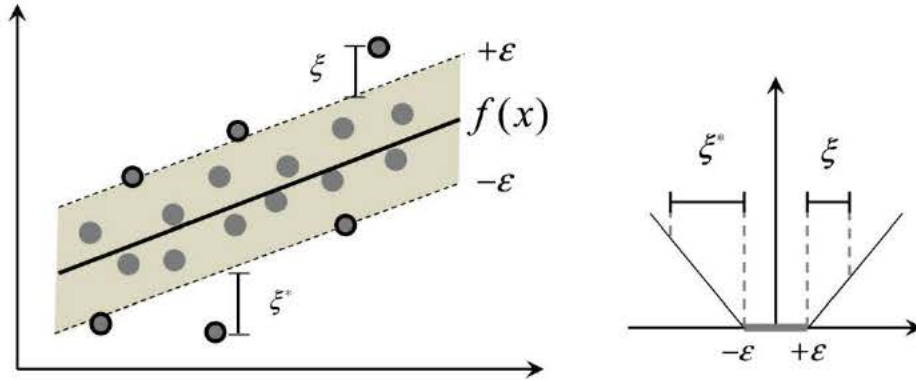


Figura 6.11: Ilustración de ε -insensitive loss function empleada en regresión mediante máquinas de vectores de soporte, adaptada de [116].

Siguiendo la descripción realizada por Smola en [116], la regresión basada en ε -SV trata de encontrar una función $f(x)$ tal que se aproxime lo suficiente al conjunto de datos de entrenamiento, (x_i, y_i) , de forma que la diferencia entre ambos nunca exceda a ε manteniendo un comportamiento tan suave como sea posible. El algoritmo ε -SVR trata de estimar funciones lineales expresadas de la siguiente forma:

$$f(x) = \langle w, x \rangle + b \quad (6.11)$$

donde $\langle w, x \rangle$ representa el producto escalar de x y w (y, por tanto f es una función escalar $f: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$). La restricción referida a la variación suave se traduce en que w tome valores lo más bajos posible, o equivalentemente, formularse bajo el problema de minimización descrito en la ecuación 6.12.

$$\begin{aligned} & \text{minimiza } \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \\ & \text{sujeto a } \left\{ \begin{array}{l} y_i - \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle - b \leq \varepsilon \\ \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle + b - y_i \leq \varepsilon \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (6.12)$$

Sin embargo, no siempre es posible asegurar que estas condiciones conduzcan hacia una solución viable, en el sentido de que exista alguna función $f(\mathbf{x})$ cuyo nivel de proximidad a los datos de entrenamiento sea siempre inferior a ε . Por ello se introducen variables mudas adicionales, ξ_i y ξ_i^* , en la formulación 6.12 junto a la constante C , que representa la relación de compromiso existente entre tolerar desviaciones con respecto al umbral ε y mantener $f(\mathbf{x})$ lo más plana posible. Estas últimas consideraciones convierten la formulación anterior en la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} & \text{minimiza } \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^l (\xi_i + \xi_i^*) \\ & \text{sujeto a } \left\{ \begin{array}{l} y_i - \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle - b \leq \varepsilon + \xi_i \\ \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle + b - y_i \leq \varepsilon + \xi_i^* \\ \xi_i, \xi_i^* \geq 0 \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (6.13)$$

En la mayor parte de los casos este problema puede resolverse de forma más eficiente en su formulación dual alternativa, la cual puede ser extendida a funciones no lineales, como las que son de interés en este trabajo. Mediante un método de dualización basado en los multiplicadores de Lagrange (α_i, α_i^*) [3] es posible alcanzar la definición dual del problema de minimización anterior, resultando en el siguiente planteamiento:

$$\begin{aligned} & \text{maximiza } \left\{ \begin{array}{l} -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*)(\alpha_j - \alpha_j^*) \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle \\ -\varepsilon \sum_{i,j=1}^l (\alpha_i + \alpha_i^*) + \sum_{i,j=1}^l y_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \end{array} \right\} \\ & \text{sujeto a } \sum_{i=1}^l y_i (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \text{ y } \alpha_i, \alpha_i^* \in [0, C] \end{aligned} \quad (6.14)$$

6.3.3.1. Desarrollo en Vectores de Soporte

Para lograr la formulación anterior ha sido necesario describir \mathbf{w} como una combinación lineal de los datos de entrenamiento, \mathbf{x}_i , como se muestra en la ecuación 6.15. Esto ha sido posible gracias al denominado desarrollo en vectores de soporte o (*Support Vector Expansion*) [116], que facilita que el algoritmo de regresión pueda implementarse exclusivamente en términos de productos escalares entre los patrones de entrenamiento. En la expresión 6.16 se muestra cómo es posible llegar a evaluar la función $f(\mathbf{x})$ sin calcular \mathbf{w} de forma explícita.

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^l y_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \mathbf{x}_i \quad (6.15)$$

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle + b \quad (6.16)$$

Dejando de un lado los detalles referidos al cálculo de b , que pueden encontrarse en [116] y [111], al igual que el resto del desarrollo aquí expuesto, es necesario ahondar en el concepto de desarrollo mediante vectores de soporte introduciendo la estrategia denominada como *kernel trick*, ya que es lo que en última instancia permite el uso de la maquinaria ε -SVR en problemas no lineales, o no separables linealmente, como en nuestro caso se comportan Q y T . La idea es trasladar la resolución del problema a un sub-espacio de dimensión mucho mayor, donde puede ser resuelto mediante algoritmos lineales, como ε -SVR en nuestro caso.

Una función de tipo *kernel* $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, mide el grado de similitud existente entre los dos vectores pertenecientes al espacio original (o *input space*) \mathbf{x}_i y \mathbf{x}_j , en base a una operación de producto escalar en un espacio de características (o *feature space*), definido éste mediante la relación de correspondencia o *mapeado* (*mapping*) entre ambos espacios dada por una función $\phi(\mathbf{x})$:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j) \quad (6.17)$$

Al igual que hemos hecho con \mathbf{w} , es posible establecer la función de kernel directamente, confiando en su correspondencia con un producto escalar definido en *algún* espacio de características, a priori de dimensionalidad mucho mayor o posiblemente infinita [9]. Esto se traduce en que la función de correspondencia $\phi(\mathbf{x})$ no tiene que ser conocida de forma explícita, lo que se conoce como *kernel trick*, y es lo que permite extender los algoritmos basados en máquinas de vectores de soporte a la resolución de problemas que no son linealmente separables en el espacio de partida [131]. Algunos de los *kernels* más empleados son el de tipo polinómico (6.18), la función sigmoide (6.19) o las funciones de base radial (RBF) (6.20).

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (1 + \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j^T)^k \quad (6.18)$$

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \tanh(\gamma \cdot \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j^T + \beta_0) \quad (6.19)$$

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = e^{-\gamma \cdot |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2} \quad (6.20)$$

6.3.3.2. Aplicación de SVR para la regresión de Q y T

Ahora que ya disponemos de una descripción matemática del algoritmo ε -SVR (partiendo de la formulación propia de un problema de optimización hasta el empleo del *kernel trick*) podemos identificar y comprender mejor los parámetros que mayor influencia tienen en la configuración del algoritmo, que son fundamentalmente: C , ε y aquellos correspondientes a la función *kernel* seleccionada.

Hemos optado por una implementación software basada en el entorno de librerías *LIBSVM* [16], disponible en los lenguajes de programación más habituales (C, C++, Java e

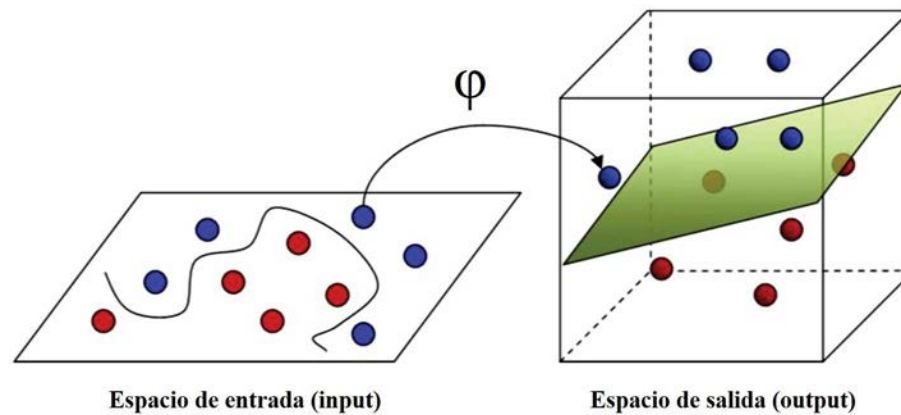


Figura 6.12: Kernel trick para llevar a cabo la regresión en un espacio de características donde las relaciones sean lineales, aunque de mayor dimensión. Ilustración adaptada de [1].

incluyendo MatLab, que será nuestro entorno de trabajo) y que incluye diferentes formulaciones de SVM para la resolución de problemas de clasificación y regresión, así como una gran variedad de opciones de configuración.

En nuestro caso llevaremos a cabo el ajuste de cada variable, (T y Q), de forma independiente, frente a la estrategia seguida en redes neuronales donde se afrontaba la obtención simultánea de ambas en base a un único modelo multivariante. Dado que la implementación de ε -SVR no nos permite esta funcionalidad, construiremos dos máquinas de vectores de soporte que toman como entrada las componentes principales de los datos experimentales, y que son entrenadas mediante los subconjuntos de componentes principales teóricos utilizados en el caso anterior.

En cuanto a la estrategia de entrenamiento, el conjunto de datos teóricos se extraerá de forma aleatoria de los mapas $Q - T$, representados en forma de sus componentes principales ($P = 5$, al igual que en los casos anteriores), asegurándonos de cubrir todo el rango de variabilidad.

Tras la realización de numerosas pruebas con los diferentes tipos de funciones disponibles, hemos concluido que los mejores resultados se obtienen mediante funciones de *kernel* de base radial (RBF), similares a las empleadas en el caso anterior (GRNN). Establecido esto, resta todavía seleccionar valores razonables para los parámetros C , γ y ε , para lo que se han considerado los siguientes criterios:

- C , parámetro de regularización. Debería tener escasa influencia si el resto de parámetros, especialmente ε , están bien seleccionados. Hemos convenido seguir a [17] y asignar a C un valor equivalente al rango de variabilidad del espacio de datos de entrenamiento y_i .
- γ y ε se encuentran íntimamente seleccionadas. No tenemos otra opción que llevar a cabo múltiples procesos de entrenamiento para obtener un mapa del error asociado a la variación de ambos parámetros, para seleccionar así la dupla de valores que menor error proporcione.

Después de multitud de tests, la mejor configuración encontrada puede resumirse en:

- ε -SVR para temperatura: $C = 100$; $\gamma = 2$, $\varepsilon = 0,02$.
- ε -SVR para densidad de columna: $C = 1000$; $\gamma = 2$, $\varepsilon = 0,1$.

Utilizando funciones de base radial en ambos casos, los resultados obtenidos a partir de la comparación con el método de ajuste iterativo se muestran en los dispersogramas de la figura 6.13. En este caso el error promedio obtenido ha sido de $431,3 \text{ ppm} \cdot \text{m}$ para la densidad de columna y de $6,5^\circ\text{C}$ para la temperatura.

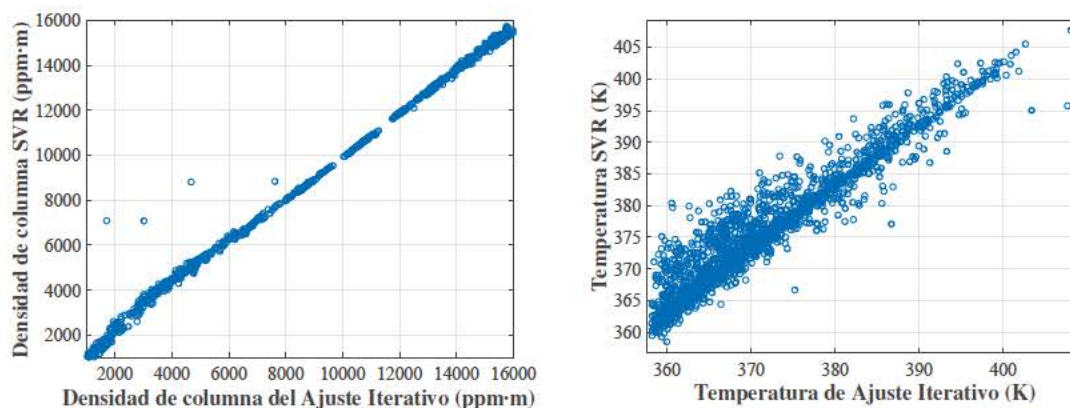


Figura 6.13: Dispersogramas para la comparación de los resultados proporcionados por la arquitectura de red MLP frente al método de ajuste iterativo. A la izquierda, comparación de la densidad de columna, y a la derecha de la temperatura, obteniéndose los coeficientes de determinación $R^2 = 0,9949$ y $R^2 = 0,88313$, respectivamente.

6.4. Análisis comparativo

Por último, y tras haber experimentado con las diferentes estrategias de generalización presentadas, finalizaremos el presente capítulo comparando las prestaciones ofrecidas por cada método. Para ello nos valdremos de la tablas 6.1 y 6.2, que sintetizan, por un lado el error promedio en las estimaciones de Q y T frente al método de ajuste iterativo, y por otro el coeficiente de determinación R^2 fruto de dicha comparación. Atendiendo a estos resultados, la primera de las conclusiones que podemos obtener es que el único método que mejora los valores obtenidos por la estrategia basada en *fuerza bruta* (etiquetado como PCA) es el que hemos denominado PCA-GRNN, que, a su vez, ha sido uno de los más sencillos de configurar. Mientras que los métodos basados en estrategias de entrenamiento más complejas, como PCA-MLP y PCA-SVR, arrojan diferencias mayores que las obtenidas mediante PCA.

Por otro lado, la solución basada en vectores de soporte es la que proporciona mayores discrepancias al comparar con el método de ajuste iterativo. De entre todas las alternativas, este método es el único que no afronta el problema de regresión a partir de un único modelo multivariante en términos de las variables de salida, ya que la implementación

práctica impedía esta funcionalidad y nos obligaba a emplear dos métodos independientes para la recuperación de Q y T . Esto puede ser uno de los motivos que explique la pérdida de prestaciones, dado que la estimación conjunta de ambas variables puede aportar información adicional, en el sentido de que, conocida una de ellas, el rango de variabilidad asociado a la restante estaría mucho más acotado.

Tabla 6.1: Cuadro resumen del error promedio por cada una de las aproximaciones implementadas en el capítulo tomando como referencia el método de ajuste iterativo y las medidas experimentales de validación del capítulo 5.

Error promedio	PCA-GRNN	PCA-MLP	PCA-SVR	PCA
Densidad de Columna [ppm·m]	151.3	346.2	431.3	319.3
Temperatura [$^{\circ}C$]	2.8	5.9	6.5	5.3

Tabla 6.2: Tabla resumen de los coeficientes de determinación obtenidos tras la comparación entre las diferentes entre las diferentes alternativas frente al método de ajuste iterativo.

Coeficiente de determinación (R^2)	PCA-GRNN	PCA-MLP	PCA-SVR	PCA
Densidad de Columna	0.99984	0.99701	0.99491	0.99701
Temperatura	0.98572	0.94836	0.88313	0.94836

En general, todas las metodologías probadas proporcionan mejores prestaciones en la estimación de la densidad de columna que frente a la variable temperatura. Esto se debe a que nuestros datos de partida son transmitancias espectrales, provenientes de espectros de absorción (ver capítulo 2), y por ello mucho más sensibles a variaciones en las líneas de absorción que a cambios en la temperatura. De hecho, es relativamente costoso lograr que los métodos de regresión sean capaces de “captar” (o aprender) con la suficiente sensibilidad las variaciones de la temperatura, aún cuando previamente partimos de una representación en un sub-espacio de ejes adaptados a nuestra señal, gracias al uso de componentes principales.

A modo de conclusión, a lo largo de este capítulo hemos logrado reducir la alta dimensionalidad de la que adolecen gran parte de las medidas de carácter hiperespectral, y que, en el caso de los sistemas que también incorporan imagen, desemboca en elevados tiempos de procesamiento y uso de recursos. Con la metodología propuesta, los tiempos de cómputo han sido reducidos en aproximadamente un factor 20, si comparamos con el método de ajuste iterativo del capítulo 5. Para ello, hemos partido de la hipótesis de que la dimensionalidad intrínseca de nuestros datos es en realidad relativamente baja, dado que un bajo número de variables determina el comportamiento de cientos de líneas espectrales, y de que ésta podría ser extraída mediante el uso de un sistema de componentes desarrollado de forma específica. Más aún, haciendo uso de los modelos radiométricos desarrollados en los capítulos anteriores, hemos logrado generar un sub-espacio adaptado a la señal de cada píxel de la imagen hiperespectral, que permite abordar el problema de la separabilidad entre densidad de columna y temperatura de una forma más efectiva.

Finalmente, se ha intentado que esta estrategia disponga de una adecuada capacidad de generalización, es decir, que dispongamos de una función, implementada de uno u

otro modo, que proporcione para cada valor de los datos medidos (en nuestro caso, componentes principales efectivas de los espectros) los valores de Q y T correspondientes, sin necesidad de recurrir a una laboriosa búsqueda iterativa como era el caso del procedimiento descrito en el capítulo 5. Con este objetivo se han explorado diferentes aproximaciones (MLP, GRNN y SVR), que en el caso particular del problema aquí estudiado han logrado una recuperación conveniente de las variables densidad de columna y temperatura, siendo ésta última la que mayores dificultades ha implicado tal y como era de suponer.

Uso eficiente de la información: algoritmo de recombinación de muestras

La **parte III** en la que nos encontramos, dentro de la descripción del trabajo que se presenta en esta tesis, tiene un doble objetivo: por un lado, presentar una alternativa más ágil para abordar la cuantificación simultánea del par $Q - T$, mediante técnicas de reducción de la complejidad unidas a una etapa de generalización; y, por otro, buscar un uso más eficiente de la información contenida en los interferogramas. Tras haber trabajado durante el capítulo anterior en el primero de los objetivos, a lo largo de este capítulo centraremos nuestra atención en obtener el mayor aprovechamiento posible de los datos adquiridos.

Para una mejor justificación de esta necesidad, pensemos por un momento en el gran volumen de datos que supone la adquisición de una sola imagen hiperespectral con una resolución espectral de $0,5 \text{ cm}^{-1}$ en el infrarrojo medio. Considerando un array de 320×256 píxeles, el número de muestras de cada interferograma será del orden de 35000 puntos (para $\lambda_s = \lambda_{HeNe}$), lo que hace un total de $5,73 \text{ GB}$, que nos lleva a plantearnos si realmente necesitamos toda esa cantidad de puntos para generar nuestros espectros. La respuesta a esta pregunta depende en gran medida del ancho de banda del espectro que intentamos reproducir, exactamente igual que en cualquier otro proceso de muestreo, habiendo casos en los que sea posible aumentar el espacio entre muestras, como al observar la emisión de un único gas caliente cuya firma espectral abarque una pequeña porción de la frecuencia máxima disponible. Sin embargo, a menudo sólo podremos reducir (o diezmar) el número de puntos de nuestro interferograma una vez que éste ya ha sido adquirido, puesto que muchos equipos imponen restricciones en el periodo de muestreo seleccionable, para así reducir en la medida de lo posible la posibilidad de sobrepasar el límite marcado por la aparición de *aliasing*. Esto provoca que, en la práctica, frecuentemente nos encontremos con cantidades de datos muy superiores a las estrictamente necesarias para reproducir el espectro medido, esto es: tenemos un *factor de sobremuestreo*.

Este hecho nos invita a hacernos una segunda pregunta, ¿podríamos emplear este grado de sobremuestreo para mejorar la relación señal a ruido de los espectros obtenidos? Nuestra siguiente hipótesis de trabajo viene dada por una respuesta afirmativa a esta cuestión, y es la motivación necesaria para desarrollar un algoritmo de recombinación de muestras que permita un uso más eficiente de los interferogramas adquiridos, donde ya

no nos limitaremos a desechar las muestras que no sean necesarias sino que intentaremos sacar provecho del sobremuestreo para reducir el nivel de ruido experimental.

7.1. Análisis introductorio

En primer lugar, es necesario aclarar que nuestro planteamiento se basa en el uso de un sistema de imagen IFTS, y que toda la discusión que sobreviene a continuación puede trasladarse al ámbito de la espectrorradiometría FTIR tradicional (sensores mono-detector), pese a que donde su aplicación conlleva un mayor interés es en el caso de los sistemas de imagen, dada la gran cantidad de datos característica de estos dispositivos.

Una vez el interferograma ha sido muestreado a través del recorrido del espejo móvil, pueden darse distintas situaciones que impongan una reducción de los datos inicialmente tomados. Uno de los ejemplos característicos es el caso de los sistemas de imagen hiperespectral embarcados en sondas o satélites espaciales, donde el volumen de los datos transmitidos a tierra supone un parámetro crítico. Junto al uso de técnicas de compresión más sofisticadas, como las ya citadas *componentes principales* o las *transformadas wavelet*, entre muchas otras, es habitual acometer una primera etapa de filtrado espectral de los datos (puesto que la región espectral en la que estemos interesados puede variar) a la que sigue un proceso de diezmo acorde al ancho de banda resultante tras el filtrado (puesto que el periodo de muestreo puede expandirse en consecuencia). En este caso, el filtrado espectral hace las veces de filtro *antialiasing*, de forma que reducir la frecuencia de muestreo no acarree problemas relacionados con el truncamiento, por lo que no supondría ninguna mejora de la relación señal a ruido, y podría entenderse como una reducción de complejidad a través de la mera selección de características, si recordamos la descripción hecha en el capítulo 6.1.

En otros ámbitos, sin embargo, sí es posible encontrar ejemplos en los que el *factor de sobremuestreo* es aprovechado para reducir la potencia de ruido, como es el caso de los conversores analógico a digital (o, en inglés, ADC). Al digitalizar una señal continua, como por ejemplo la medida de la temperatura proporcionada por una resistencia tipo RTD, es probable que requiramos disponer de una gran resolución de medida junto a un también elevado rango dinámico y relación señal a ruido. Una de las técnicas que pueden emplearse para mejorar la resolución en la conversión se denomina *oversampling and average* o también *oversampling and decimation*, consiguiendo que puedan obtenerse resoluciones equivalentes a las alcanzadas con conversores de un mayor número de bits.

El aumento del número de bits efectivos (ENOB), el parámetro que caracteriza las prestaciones de un conversor AD, viene propiciado por un aumento en la calidad de la señal¹. Sin embargo, y aunque existen una serie de restricciones para poder lograr beneficios de esta técnica, al margen de consideraciones referentes a la codificación, es posible concluir que: el ruido tiene que ser *blanco* y superior al ruido de cuantificación, como se explica en [66] y en [54].

Dejando estas cuestiones de un lado, nos valdremos de la figura 7.1 para ilustrar el proceso de mejora de la SNR mediante el uso del sobremuestreo. En dicha figura, si com-

¹Es habitual considerar la relación [62]: $\text{SINAD}(\text{dB}) = 6,02 \cdot \text{ENOB} + 1,76$, donde SINAD es una figura que mide la relación señal a ruido incluyendo la distorsión.

paramos las alternativas representadas A y B, se observa la relación existente entre la frecuencia de muestreo y el ancho de banda obtenido (sin más que aplicar el teorema de Nyquist); de forma que al suponerse ruido blanco, este se distribuye a lo largo de todo el espectro disponible, reduciendo así su densidad espectral de potencia (DEP) conforme la frecuencia de muestreo aumenta. Sin embargo, la señal no sigue este mismo comportamiento, y mantiene su distribución de energía, lo cual provoca un incremento de la SNR.

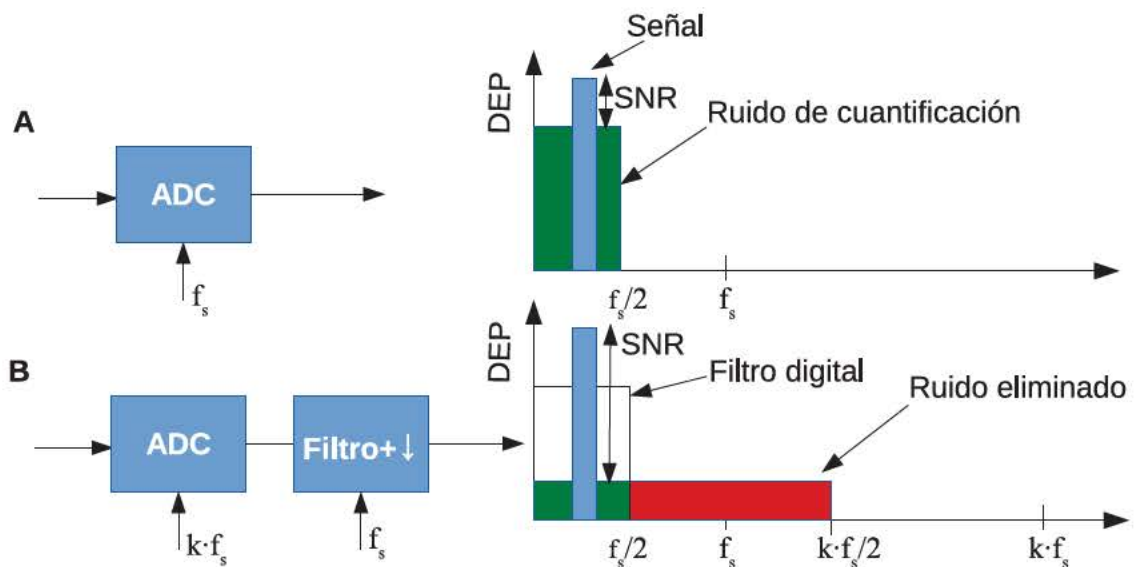


Figura 7.1: Ilustración del proceso de reducción de ruido mediante el sobremuestreo, representándose un ejemplo de conversor analógico digital en términos de la densidad espectral de potencia (DEP).

En analogía con este tipo de técnicas de digitalización, nuestro planteamiento se basa en que el ruido blanco no puede ser reproducido correctamente a través de sus muestras. La idea principal consiste en generar distintas versiones del espectro de medida a partir de las distintas versiones (aunque desfasadas) que pueden obtenerse mediante el diezmado del interferograma de partida, que en multitud de casos se encuentra sobremuestreado, por lo que existe un amplio margen. Es posible alcanzar así un número suficiente de versiones tal que su promedio suponga una reducción de ruido significativa, pudiendo ser equiparable al que se obtendría si todas las muestras empleadas provinieran de interferogramas adquiridos de forma independiente.

A lo largo de este capítulo comenzaremos describiendo las bases del proceso de muestreo en sistemas FTIR, para después abordar el diezmado y la generación de versiones de ruido, desarrollando el concepto de *factor de fase* (en analogía con los *arrays* de elementos radiantes empleados en el diseño de antenas [4]) en la implementación práctica. Tras esto, se exponen distintas simulaciones con interferogramas sintéticos con el objetivo de comprobar las prestaciones enunciadas. Por último, se muestran los resultados de aplicar este procedimiento en aplicaciones experimentales reales: sobre un interferograma proveniente de un quemador Bunsen.

7.2. Teoría de muestreo en sistemas FTIR

Cada vez que nos enfrentamos al problema de digitalizar una señal analógica debemos responder a la pregunta de cómo seleccionar de forma adecuada la separación entre muestras, esto es, el periodo de muestreo T_s . Cuando dicha señal proviene de un interferómetro de Michelson, se aplican las reglas comúnmente conocidas para señales paso banda y que relacionan la frecuencia de muestreo (en este caso, ν_s) con el ancho de banda de la señal a muestrear ($\Delta\nu$). El teorema de Nyquist establece la máxima separación entre muestras de forma tal que la señal muestreada pueda ser reconstruida posteriormente con el menor grado de ambigüedad e incertidumbre posible, resultando en que $\nu_s > 2\Delta\nu$. Es importante, sin embargo, tener presente un matiz conceptual, en el sentido de que el objetivo último del muestreo del interferograma no se corresponde con su mera digitalización, sino con la obtención de la distribución espectral de la intensidad radiante, tal y como se emplea en el ámbito de la espectrometría basada en transformada de Fourier.

Puesto que dicha operación de muestreo es llevada a cabo en el dominio del interferograma, fruto de la recombinación de haces en el interior del interferómetro, es necesario considerar de nuevo la expresión 4.9 que nos permite relacionar el interferograma que ahora denominaremos continuo $I_c(x)$ con la distribución espectral de radiancia $\mathcal{L}(\nu)$, función de la diferencia de camino óptico entre los dos brazos del interferómetro (aquí denominada x).

$$I_c(x) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \mathcal{L}(\nu) \{1 + \cos(2\pi\nu x)\} d\nu$$

En la práctica, es habitual considerar que $\mathcal{L}(\nu)$ se corresponde con una versión de la radiancia incidente filtrada paso banda por la responsividad espectral del detector y la transmitancia de la óptica. Este filtrado contribuye a la supresión de las frecuencias más bajas, que son precisamente aquellas más problemáticas en caso de producirse *aliasing*, haciendo posible que la condición de muestreo se relaje. De acuerdo al diagrama de bloques de la figura 7.2, el elemento detector se modela a efectos prácticos como un filtro anti-aliasing.

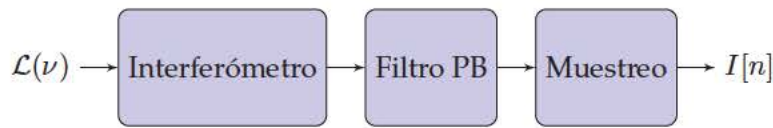


Figura 7.2: Diagrama de bloques del proceso de muestreo en un sistema FTIR.

La versión digitalizada (discreta) de la señal interferencia entre ambos haces del interferómetro se obtiene como el muestreo de $I_c(x)$, $I[n] = I_c(nT_s)$. Introduciendo una notación más conveniente desde el punto de vista del tratamiento digital de señales, el interferograma muestreado $I_s(x)$ puede expresarse como el producto de la señal original con un tren de impulsos, cuya separación entre deltas de Dirac es igual al periodo de muestreo T_s seleccionado, de forma que se obtiene:

$$I_s(x) = I_c(x) \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nT_s) \quad (7.1)$$

7.2.1. Sobremuestreo y diezmado

En los sistemas FTIR comercialmente disponibles (sean estos o no de imagen), la frecuencia de adquisición no siempre es un parámetro que pueda ser modificado a voluntad en función del escenario de medida. Y, aunque en ocasiones sí pueda ser alterado, la gama de valores seleccionables queda habitualmente restringida y no suele permitir aquellos valores que puedan incurrir en *aliasing*, de modo que los interferogramas medidos se encuentran en numerosas ocasiones *sobremuestreados*. En otros casos, es el propio desconocimiento de la distribución espectral lo que conlleva que se prefieran configuraciones más conservadoras, que pueden dar lugar a niveles de sobremuestreo innecesarios.

Por otro lado, y de forma adicional, la condición de muestreo de Nyquist puede ser incluso más permisiva si se prescinde de las frecuencias negativas, dado que para señales reales y con simetría par, como es nuestro caso, la transformada de Fourier es simétrica. Para ello basta con recurrir a la *transformada de Hilbert* [63] para la construcción de una señal analítica correspondiente al interferograma, que a partir de este momento será una señal compleja expresada como:

$$I_a(x) = I(x) + j \cdot \mathcal{HT}\{I(x)\} \quad (7.2)$$

Mediante esta transformación, y ya sin componentes negativas, la condición de muestreo queda reducida a que la frecuencia de muestreo sea al menos superior al ancho de banda de la señal a convertir, $\nu_s \geq \Delta\nu$.

Este hecho resulta de especial interés en los sistemas de imagen hiperespectral basados en FTIR. Debido al gran volumen de datos, es conveniente considerar la posibilidad de llevar a cabo un proceso de diezmado sobre los datos adquiridos, a fin de reducir su volumen, previamente a la aplicación de procesados posteriores específicos.

Antes de continuar, consideraremos un ejemplo en el que se ha simulado un interferograma correspondiente al espectro de emisión de un cuerpo negro (ancho espectral de 2000 a 3000 cm^{-1}) a 300°C, donde se ha empleado como periodo de muestreo la longitud de onda de un láser HeNe, de valor 632,8 nm, es decir $\nu_s = \frac{1}{\lambda_{\text{HeNe}}}$. Esto implica un factor de sobremuestreo $\frac{\nu_s}{\nu_{\text{Nyquist}}} = 7$, lo que significa que se han adquirido del orden de 7 veces más muestras que las requeridas para satisfacer la condición de Nyquist. Empleando dicho interferograma, en la figura 7.3 se ha representado de forma gráfica el proceso de diezmado para un factor de reducción igual a 4, de forma que la condición de muestreo se verifique con holgura. Se muestran de forma explícita las diferentes versiones del interferograma que pueden obtenerse durante el proceso de diezmado, sin más que seleccionar puntos de inicio diferentes, separados cada uno un cierto offset (m) en términos de muestras.

Este ejemplo ilustra cómo para un factor de diezmado (FD) dado, cabe la posibilidad de generar al menos tantas versiones ($I_m(x)$) como el valor de dicho factor, donde todas ellas siguen cumpliendo los criterios de muestreo que aseguran una correcta reconstrucción de la información de partida. Esta idea puede expresarse de forma analítica como:

$$I_m(x) = I(x) \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nT_s + m) \quad (7.3)$$

donde $m = 0, 1, \dots, FD - 1$.

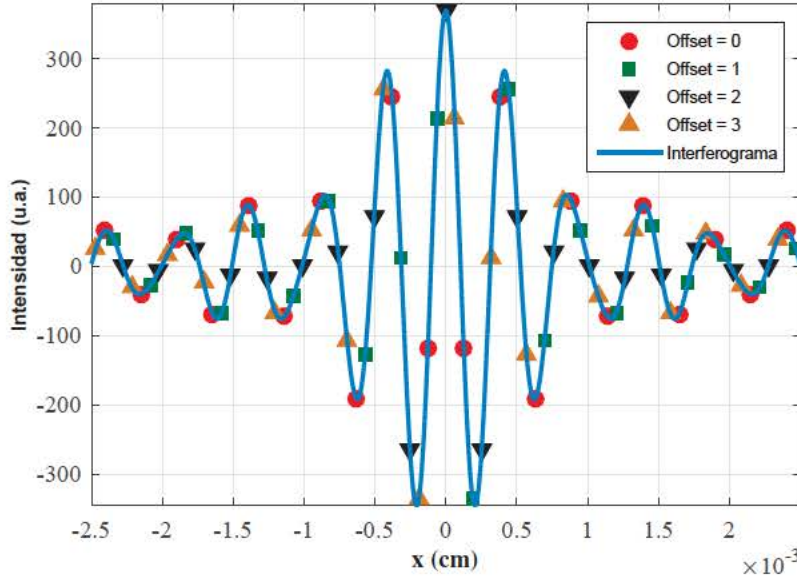


Figura 7.3: Figura con distintos valores de offset para factor de diezmado igual a 4.

De forma general, y siempre y cuando el factor de diezmado empleado garantice la ausencia de *aliasing* y la recuperación de $S(\nu)$, es fácil demostrar que los espectros ($S_m(\nu)$) producidos tras la síntesis de las diferentes versiones ($I_m(x)$) se relacionan entre sí mediante una función de cambio de fase, fruto de los desplazamientos introducidos en la función de muestreo, tal y como se muestra en la ecuación 7.4, en la que se desarrolla el proceso de muestreo en el dominio espectral, desembocando en la extensión periódica de $S(\nu)$, considerándose los distintos puntos de inicio m posibles, mediante su traducción en el término de fase $e^{-j\nu m}$.

$$\begin{aligned}
 S_m(\nu) &= S(\nu) * \mathcal{F} \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nT_s - m) \right\} = \\
 &= S(\nu) * \left[\frac{2\pi}{T_s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta \left(2\pi \left(\nu - \frac{n}{T_s} \right) \right) \cdot e^{-j\nu m} \right] = \\
 &= \frac{2\pi}{T_s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} S \left(2\pi \left(\nu - \frac{n}{T_s} \right) \right) \cdot e^{-j\nu m}
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

Sin embargo, este desarrollo no es válido para el ruido habitualmente presente en toda medida experimental, ya que éste comúnmente se encuentra distribuido en un ancho de banda mucho mayor al que permite el periodo de muestreo. Explicado de forma más intuitiva, las distintas versiones desfasadas del interferograma diezmado darán lugar al *mismo espectro de partida* mientras que presentarán *distintas versiones del espectro de ruido*, puesto que existirá un cierto grado de ambigüedad en la síntesis espectral del ruido al no cumplir la condición de muestreo.

Este comportamiento da pie a considerar la idea de que las distintas versiones obtenidas, y que de otra forma hubieran sido desechadas, ahora puedan ser empleadas para mejorar la relación señal a ruido del espectro final, obteniendo así provecho de todas las muestras adquiridas en el interferograma. Y es precisamente alrededor de esta hipótesis sobre la que girará el algoritmo de recombinación de muestras presentado en la siguiente sección.

7.3. Algoritmo de recombinación de muestras

Tal y como adelantábamos, el punto de partida del algoritmo propuesto reside en la construcción de diferentes versiones del espectro original a partir de las muestras tomadas en exceso gracias al factor de sobremuestreo. Dichas versiones dan lugar a distintas realizaciones de la distribución de ruido en cada una de ellas; para un factor de diezmado dado, se producirían al menos tantas versiones de ruido como dicho factor sin más que considerar distintos puntos de inicio en el muestreo. Pero pueden lograrse más si extendemos este procedimiento a todos los factores de diezmado posibles hasta alcanzar el máximo permitido. Por otro lado, el impacto que en la reducción de ruido tendrán las distintas combinaciones vendrá determinado por su nivel de correlación, el cual es un factor característico de la naturaleza de las muestras de ruido presentes.

En la práctica, nos veremos obligados a tomar en consideración la influencia de otros factores adicionales. Comenzaremos para ello partiendo del modelo expresado en la ecuación 7.5 donde se introduce tanto la influencia de ruido aditivo como el hecho de contar con un número finito de puntos en el interferograma, esto es, una resolución espectral también finita.

$$S(\nu) = (\mathcal{L}(\nu) + \eta(\nu)) * \text{ILS}(\nu) \quad (7.5)$$

siendo $\mathcal{L}(\nu)$ el espectro de medida, de carácter determinista, $\text{ILS}(\nu)$ la forma de línea instrumental, y $\eta(\nu)$ el ruido presente en el interferograma, en general de tipo *AWGN*, *Additive White Gaussian Noise*, ya que habitualmente proviene del ruido térmico que limita las prestaciones de la mayor parte de detectores en el infrarrojo (aunque pueden considerarse otras fuentes de ruido como el ocasionado por fluctuaciones en la fuente de emisión, tal y como veremos en el capítulo 8 correspondiente a la última parte de esta tesis).

Por otro lado, es conveniente considerar en este punto que en la gran mayoría de situaciones la información espectral es obtenida a partir de la transformada discreta de Fourier (DFT por sus siglas en inglés) mediante las diferentes implementaciones computacionalmente muy eficientes que se encuentran disponibles, como el algoritmo FFT de sobra conocido. Esto puede entenderse a su vez como el muestreo de la transformada de Fourier de la secuencia discreta que conforma el interferograma experimental, dado que es una función de carácter continuo. Por ello, de aquí en adelante sustituiremos la obtención de $S(\nu)$ por la de la secuencia discreta $S[k]$, obtenida a partir de $I[n]$ y que, en ausencia de errores de muestreo y no idealidades, viene dada por:

$$S[k] = \sum_{n=0}^{N-1} I[n] e^{-j \frac{2\pi}{N} kn} \quad (7.6)$$

A partir de ésta última expresión es sencillo obtener las diferentes versiones $S_m[k]$ que posibilita el factor de diezmado. Si ahora también incluimos los términos asociados a las no idealidades que antes ignorábamos, se obtiene que:

$$S_m[k] = S[k] \cdot e^{-j(\frac{2\pi km}{N} - \phi_0[k])} = \left\{ \sum_{n=0}^{N-1} I[n] e^{-j\frac{2\pi}{N} kn} \right\} \cdot e^{-j(\frac{2\pi km}{N} - \phi_0[k])} \quad (7.7)$$

Al margen del término de fase correspondiente al punto de inicio de cada versión, $e^{-j\frac{2\pi km}{N}}$, la ecuación 7.7 también contempla la inclusión del término de fase $e^{j\phi_0}$ que da cuenta de todos los términos responsables de la asimetría en el dominio del interferograma en torno a la posición de ZPD (*Zero Path Difference*), como son los errores de muestreo u otras no linealidades derivadas del funcionamiento interno del interferómetro (véase el apartado 4.2.4 de esta tesis). De esta forma seguirá siendo posible utilizar la condición de simetría para mejorar la relación señal a ruido del espectro obtenido, tal y como se suele hacer con los métodos de corrección de fase convencionales. Dicho término de fase es común a todas las versiones generadas fruto del diezmado, por lo que es conveniente que éste sea corregido previamente en el dominio del interferograma mediante el método de Forman (ver sección 4.2.4), ya que la corrección de fase de Mertz implicaría una transformación adicional que alteraría la distribución del ruido.

Hechas las consideraciones anteriores, el algoritmo propuesto pretende extraer el mayor número de versiones espectrales, que serán posteriormente promediadas con el objetivo de reducir la potencia de ruido. Sin embargo, los términos de fase sí han de ser convenientemente estimados y sustraídos si queremos ser capaces de recuperar $S[k]$ sin que ésta sufra distorsión alguna. Para ello, disponemos de varias alternativas: bien llevar a cabo la corrección de fase de cada interferograma de forma independiente o bien sintetizar la información referente a las fases de cada versión en un único término. La última opción permite que la operación de promediado pueda realizarse en el dominio del interferograma, al menos para un mismo factor de diezmado, y de forma que sólo sea necesario realizar una única síntesis de frecuencia mediante la transformada de Fourier, lo que resulta computacionalmente mucho más eficiente. Promediando para el conjunto de versiones proporcionadas por un mismo factor de diezmado FD, obtendríamos:

$$S_{ave}[k] = \frac{1}{FD} \sum_{m=0}^{FD-1} S_0[k] e^{-j\frac{2\pi km}{N}} = \frac{S_0[k]}{FD} \sum_{m=0}^{FD-1} e^{-j\frac{2\pi km}{N}} \quad (7.8)$$

Donde se aprecia que la suma de todos los términos de desfase puede realizarse de forma independiente al proceso de transformación, y posteriormente aplicarse al espectro obtenido. El sumatorio en la ecuación anterior muestra lo que hemos denominado como *Factor de Fase* (PF por sus siglas en inglés), y que reúne el efecto de los desfases producidos por cada punto de inicio de muestreo posible.

$$PF = \sum_{m=0}^{FD-1} e^{-j\frac{2\pi km}{N}} = \frac{1 - e^{-j2\pi km}}{1 - e^{-j\frac{2\pi km}{N}}} = \frac{\sin(\pi km)}{\sin(\frac{\pi km}{FD})} \cdot e^{j\frac{\pi km(FD-1)}{FD}} \quad (7.9)$$

Conceptualmente, es posible interpretar la función PF de forma análoga al denominado *Factor de Array* en el ámbito de la propagación electromagnética, empleado para

el cálculo del diagrama de radiación producido por arrays lineales uniformes, esto es, constituidos por elementos radiantes equivalentes dispuestos con una separación espacial constante y alimentados con la misma intensidad de señal.

Volviendo la vista a la expresión 7.5, el espectro obtenido ha de preservar la información correspondiente a $\mathcal{L}(\nu)$, dada su naturaleza determinista y puesto que la condición de muestreo así lo garantiza. Sin embargo, el ruido estimado a partir de las muestras del interferograma no cumple la condición de muestreo, dada su naturaleza térmica y por ende su equidistribución espectral. Esto provoca que cada versión contenga una distribución de ruido idealmente incorrelada del resto, lo que conlleva que al combinarse las distintas versiones así generadas se reduzca el nivel de ruido.

La varianza del espectro promedio para un factor de diezmado FD dado, viene determinada por:

$$Var\{S_{ave}\} = \frac{1}{FD} \sum_{m=0}^{FD-1} \sigma_{\eta}^2 + 2 \sum_{i \leq m} \sum_{j \leq m} Cov(S_i, S_j) \quad (7.10)$$

donde la potencia de ruido original es σ_{η}^2 . Esta ecuación implica que para muestras de ruido incorreladas sería posible reducir la potencia de ruido en un factor equivalente al de diezmado. Sin embargo, esto es difícil de asegurar en la práctica y normalmente existirá un cierto grado de correlación entre las muestras, lo que hará que el proceso de reducción de varianza de ruido no sea tan eficiente. Este es uno de los motivos por los que es conveniente extender este procesado a todos los factores de diezmado que puedan emplearse, a fin de contemplar la mayor variedad posible de versiones a promediar.

A modo de resumen, se muestra a continuación en el algoritmo 1 la secuencia de operaciones en pseudocódigo con la implementación del algoritmo propuesto para la recombinación de muestras a partir de un interferograma sobremuestreado y una tasa de diezmado máxima. El proceso se inicia con la obtención de la versión analítica de dicho interferograma, a partir de la transformada de Hilbert, para posteriormente llevar a cabo la corrección de fase sobre este último. Tras esto, se contempla la utilización de todos los factores de diezmado posibles, desde FD_{max} hasta 1, y para cada uno de ellos se establece el factor de fase asociado (PF) y se promedian los interferogramas correspondientes a las m versiones posibles. El espectro para un factor de diezmado dado se obtiene como la parte real de la transformada de Fourier del interferograma promedio y el producto con el factor de fase. Y por último, el espectro final resulta de promediar dichos espectros convenientemente normalizados en energía, para así compensar las diferencias debidas al número de muestras.

7.3.1. Simulaciones

El objetivo de esta sección es evaluar de forma práctica el comportamiento y las prestaciones predichas en la descripción teórica del algoritmo de recombinación de muestras propuesto. Para ello, se reproducirán todos los pasos necesarios partiendo de interferogramas generados de forma sintética a partir de la expresión 4.9, donde las distribuciones espectrales utilizadas consistirán en casos sencillos como un perfil espectral plano o el de un emisor cuerpo negro.

En primer lugar, comenzaremos simulando este último caso donde se empleará un

Algorithm 1 Algoritmo de recombinación de muestras

```

1: procedure RECOMBINACIÓNDEMUESTRAS( $I[n], FD_{max}$ )
2:   construcción de igm analítico ▷ Transformada de Hilbert
3:   corrección de fase  $\phi_0$  ▷ Método de Forman
4:   for  $FD = FD_{max} : -1 : 1$  do
5:     calcula  $PF$  ▷ Función Factor de Fase
6:     for  $m = 0 : FD - 1$  do
7:        $I_c = \text{circshift}(I[n], m)$ 
8:        $I_m[k] = \text{downsample}(I_c, FD)$ 
9:     end for
10:    end
11:     $I_{medio} = \text{promedio}(I_m)$ 
12:     $S_{FD} = (FD - 1)/FD_{max} * \text{Real}(\mathcal{FT}\{I_{medio}\}/PF)$ 
13:  end for
14:  end
15:   $S_{medio} = \text{promedio}(S_{FD})$ 
16:  return  $S_{medio}$ 
17: end procedure

```

emisor de cuerpo negro como el que se describía en la sección 7.2.1, al que se le ha añadido ruido de carácter aditivo a partir de un generador de muestras aleatorias. Pese a que en aquella ocasión, y en aras de una exposición más clara, sólo se representaban las distintas versiones para un factor de diezmado igual a 4, en este caso emplearemos el máximo factor de diezmado posible, $FD = 15$ para el interferograma analítico construido mediante la transformada de Hilbert.

Precisamente fruto de este diezmado, es habitual que la secuencia de frecuencias obtenida resulte plegada (*folding*, en inglés), esto es, sufra una rotación circular en función del ancho de banda permitido por el muestreo y la posición y ancho de banda de la señal muestreada. Un ejemplo de este comportamiento puede verse en la figura 7.4, lo que implica que el factor de corrección de fase ha de aplicarse convenientemente introduciendo modificaciones equivalentes (operación comúnmente denominada *alias unfolding*). En la práctica este efecto puede corregirse sin más que llevar a cabo una operación de rotación circular sobre las muestras del espectro:

$$S_{uf}[\nu] = \text{circshift}(S[\nu], -k_b - 1) \quad (7.11)$$

donde $k_b = \text{mod}(\text{round}(\frac{\nu_0}{\Delta\nu}), FD)$ y $\nu_0 = \text{floor}(\frac{\nu_{min} + \nu_{max}}{2\Delta\nu} - BW) \cdot \Delta\nu$. Es posible encontrar información adicional tanto de esta técnica como de otros procesados en la cadena de adquisición, en la documentación que la Agencia Espacial Europea (ESA) facilita sobre el instrumento MIPAS (*Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding*) [14].

Una vez solucionados este tipo de detalles en la implementación, el algoritmo de recombinación de muestras propuesto ha sido aplicado y los resultados representados en la figura 7.5, donde se muestra el promedio de las $Q = FD \cdot (FD - 1)/2$ versiones posibles junto a distintas versiones individuales correspondientes a diferentes niveles de *offset* en el proceso de diezmado. En este caso se puede apreciar a simple vista una clara reducción de

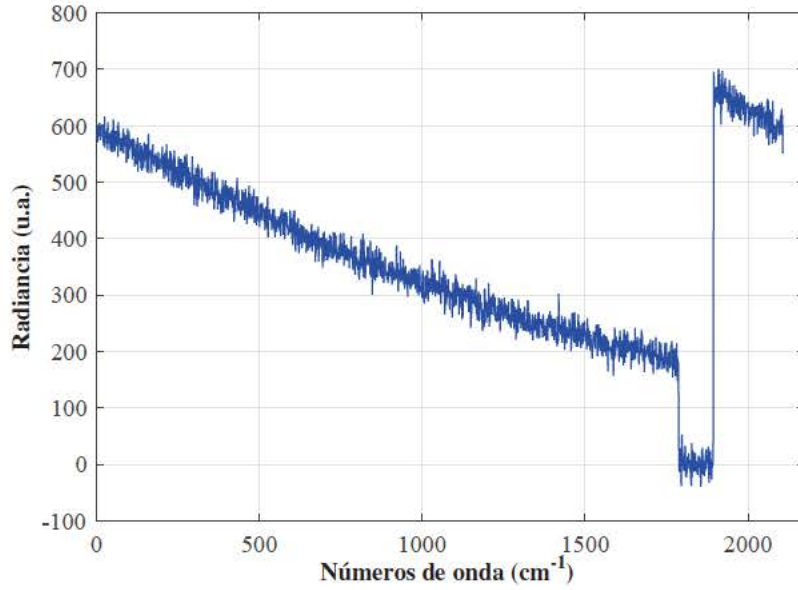


Figura 7.4: Ejemplo de plegado de frecuencias como consecuencia del proceso de diezmado sobre un espectro de cuerpo negro.

la potencia de ruido, aunque sería conveniente evaluar la mejora obtenida y comprobar si todas las muestras empleadas pueden procesarse de forma tal que la varianza de ruido se reduzca de forma equivalente a si éstas provinieran de interferogramas independientes. Esto es precisamente lo que comprobaremos a continuación con el ejemplo siguiente.

Tras ilustrar de forma cualitativa el comportamiento del procedimiento descrito, se ha seleccionado una distribución espectral consistente en un pulso de potencia constante en un ancho de banda comprendido entre 2000 y 3000 cm^{-1} , para así poder detectar con facilidad cualquier tipo de distorsión en caso de que ésta llegara a producirse, y a la que se ha añadido un ruido gaussiano de potencia σ_η^2 equiparable al caso anterior. También hemos empleado un periodo de muestreo igual a λ_{HeNe} y un número de muestras tal que la resolución espectral conseguida en términos de separación entre frecuencias consecutivas es de 0,5 cm^{-1} . Del mismo modo que trabajaremos con la versión analítica del interferograma para evitar el aliasing con las frecuencias negativas y reducir el número de muestras un factor 2.

En la figura 7.6 se compara una versión del espectro promedio de todas las versiones generadas por el algoritmo con dos espectros seleccionados de forma aleatoria entre los generados, para así comprobar la mejora producida en la relación señal a ruido. Dado que en este caso el objetivo es cuantificar las prestaciones de la metodología propuesta, es necesario definir una magnitud, R_{var} en nuestro caso, que permita evaluar la mejora producida en función del número de versiones promediadas. En la expresión 7.12 se define ésta como la ratio entre la varianza espectral de partida y la acumulada, esto es, para el promedio de las versiones generadas en orden decreciente con el factor de diezmado. De forma que q recorre todas las posibles versiones, $q \in \{1, \dots, Q\}$, que pueden obtenerse siguiendo la secuencia decreciente de factores de diezmado $FD \in \{FD_{max}, FD_{max-1}, \dots, 1\}$.

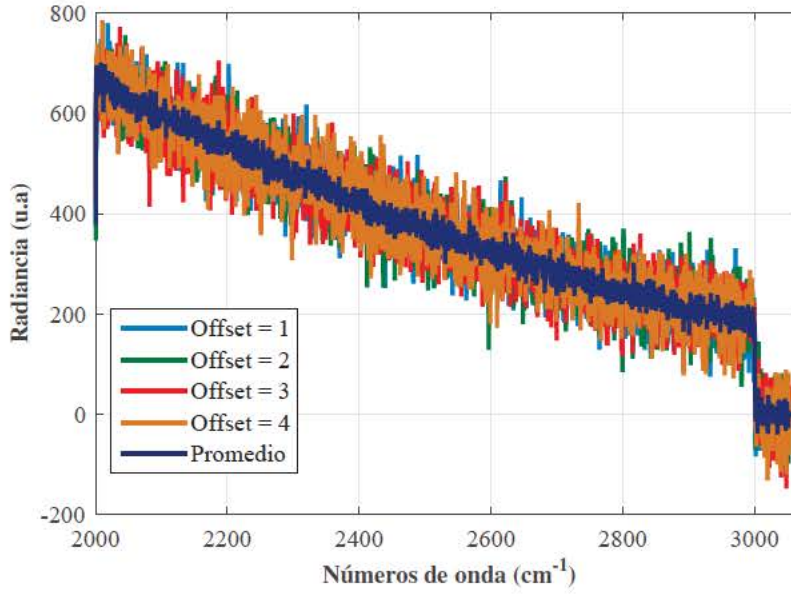


Figura 7.5: Ejemplo de aplicación del algoritmo de recombinación, donde se muestra el resultado de promediar todas las versiones obtenidas junto a versiones individuales.

$$R_{var}(q) = \frac{\sigma_{\eta}^2}{Var \{ \sum_{m=1}^q S_m[k] \}} \quad (7.12)$$

Un ejemplo de la obtención de R_{var} sobre el pulso de radiación se muestra en la figura 7.7, donde se ha delimitado el ancho de banda espectral usado en el cálculo seleccionando un intervalo central para evitar posibles efectos de borde. Conforme espectros provenientes de distintas versiones del interferograma de partida son promediados, la varianza de ruido decrece hasta alcanzar R_{var} un máximo local, en este caso, $R_{var}^{max} = 14,83$. Este valor resulta muy próximo al valor del máximo factor de diezmado permitido $FD_{max} = 15$, aunque para conseguirlo es necesario promediar más de 15 versiones del interferograma y, en concreto, hay que recurrir a los dos factores de diezmado más elevados $FD = \{15, 14\}$ (lo que demuestra que, a pesar de estar generado por software, las muestras de ruido no están completamente incorreladas). En dicho máximo, todos los puntos del interferograma original son procesados de forma equivalente a si estos provinieran de distintas realizaciones o procesos de barrido, dado que se ha empleado un ruido con baja correlación entre muestras consecutivas.

La figura 7.7 muestra también que añadir aún más versiones no se traduce en una disminución adicional del ruido, sino, por el contrario, en un aumento, debido a la covarianza entre espectros de ruido (en el caso ideal, cuando el ruido se encuentre perfectamente incorrelado entre muestras consecutivas, bastaría con emplear FD_{max} versiones para así alcanzar la máxima reducción de varianza posible).

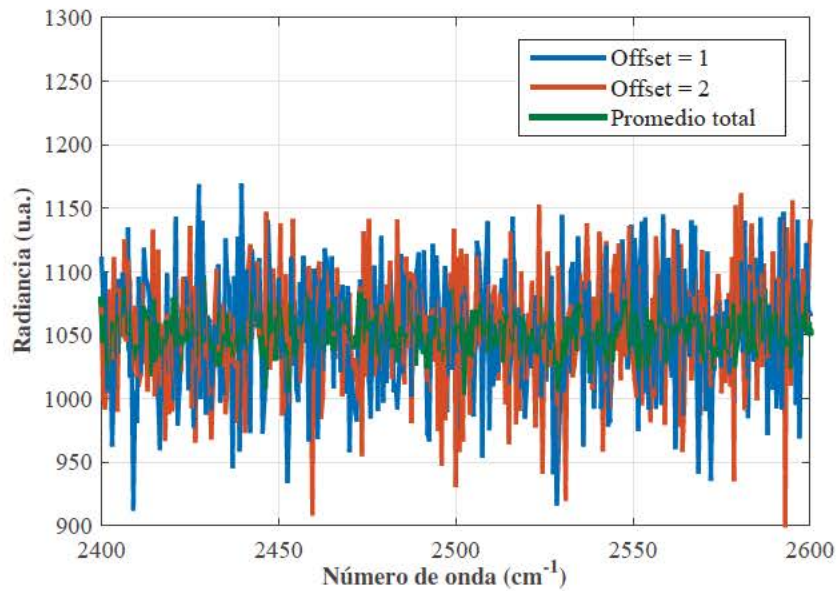


Figura 7.6: Algoritmo de recombinación de muestras sobre un espectro plano: comparación del promedio frente a espectros individuales.

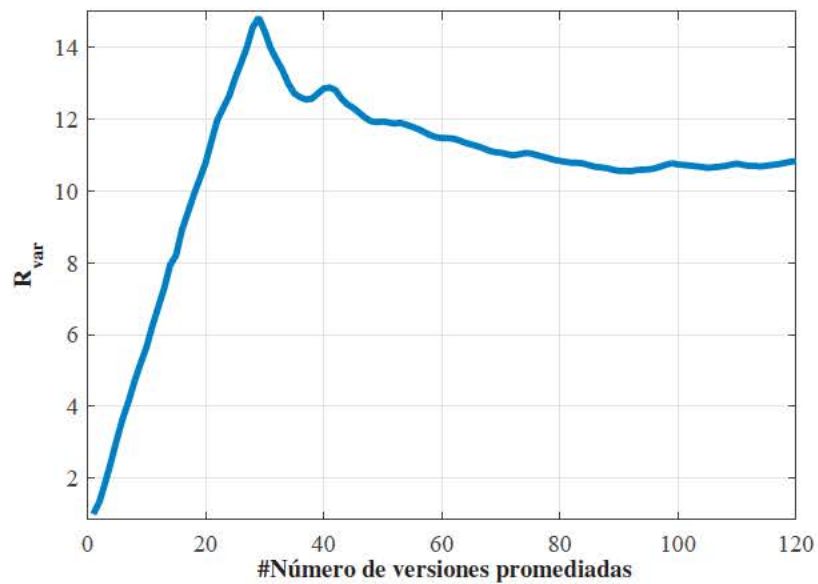


Figura 7.7: Evolución de la varianza de ruido conforme se promedian versiones espectrales generadas con el algoritmo de recombinación de muestras, expresada esta en términos de R_{var} .

7.4. Aplicación en casos experimentales

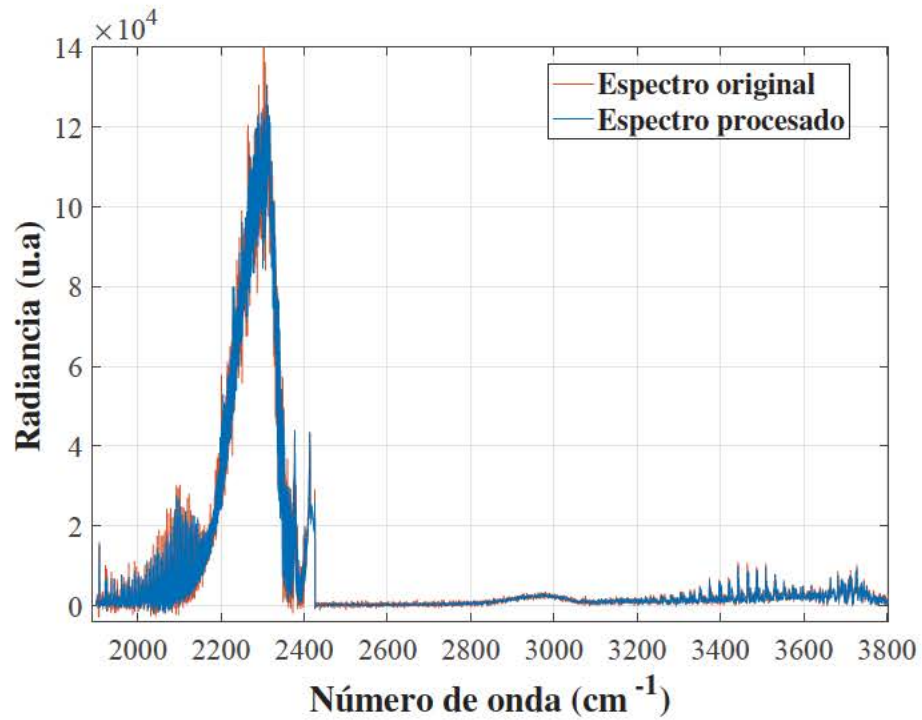
Los resultados y procedimientos planteados pueden extenderse a cualquier espectrómetro basado en transformada de Fourier, independientemente del ancho de banda de trabajo y la tecnología de detección empleada. Sin embargo, donde su uso representa una ventaja a todas luces significativa es en los sistemas de imagen hiperespectral, dado el alto volumen de datos que implica el trabajo con estos dispositivos, y donde es patente la necesidad de incrementar la eficiencia del tratamiento de datos que actualmente se emplea.

Al igual que hemos venido haciendo durante la práctica totalidad del desarrollo de esta tesis, emplearemos el espectrorradiómetro de imagen FIRST-MW de Telops, cuyas especificaciones técnicas pueden encontrarse en el capítulo 4. Dicho sistema opera en el rango espectral correspondiente al infrarrojo medio extendido, entre $1,5$ y $5,5\mu m$, y al igual que en los ejemplos descritos en la sección de simulaciones, emplea un periodo de muestreo igual a λ_{HeNe} y permite alcanzar resoluciones espectrales del orden de $0,25\text{ cm}^{-1}$. Dicho potencial obliga en la práctica al manejo de cantidades de datos nada desdeñables, debido en parte a la imposibilidad de adaptar la frecuencia de muestreo a las características de la medida.

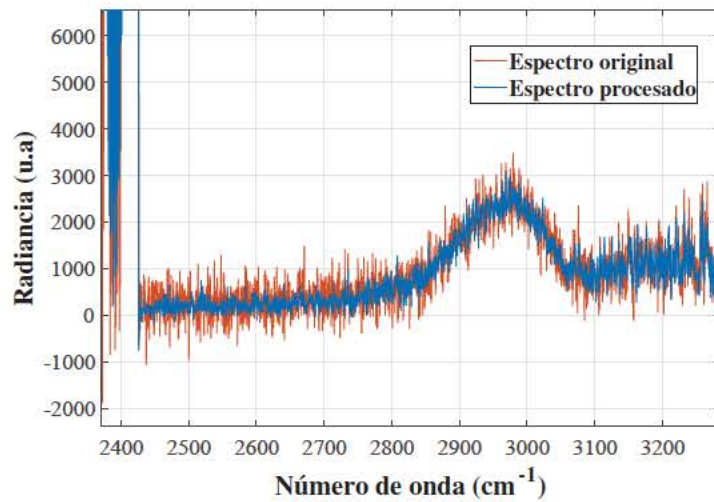
Aplicaremos el algoritmo propuesto sobre los interferogramas correspondientes a la emisión de un quemador de metano, donde se ha seleccionado una resolución espectral de $0,5\text{ cm}^{-1}$ y una sub-ventana de 120×100 píxeles. Tras un primer análisis, se comprueba que el ancho de banda de interés está concentrado en la región comprendida entre 1950 y 3950 cm^{-1} , correspondiente a las bandas de emisión en el infrarrojo medio de los compuestos CO , CO_2 y vapor de agua. Dado que $BW = 2000\text{ cm}^{-1}$, es posible alcanzar un factor de diezmado máximo igual a 7 tras obtener una versión analítica del interferograma mediante la transformada de Hilbert. En la figura 7.8a se ha representado el espectro de emisión obtenido en un píxel ubicado en la zona central de la llama sin usar el algoritmo de recombinación, junto al espectro obtenido por el algoritmo de recombinación de muestras con $FD_{max} = 7$.

Al objeto de lograr una estimación cuantitativa de la reducción en el nivel de ruido lograda, se ha estimado la función R_{var} en una región espectralmente plana, libre de las firmas espectrales de los gases presentes, comprendida entre 2450 y 2600 cm^{-1} , tal y como se muestra en la imagen ampliada mostrada en la figura 7.8b. A simple vista es posible comprobar como la varianza de ruido se ha reducido en un factor similar, como mínimo, al factor de sobremuestreo que presentaba el interferograma de partida. Una conclusión inmediata es que se ha hecho un uso eficiente de las muestras tomadas en exceso que han sido ahora aprovechadas para reducir el factor de ruido en lugar de ser desechadas. Un análisis cuantitativo en términos de la reducción de varianza de ruido en función del número de versiones generadas se representa en la figura 7.9, donde en este caso el valor máximo se alcanza al emplear todas las posibles versiones ($Q = 7 \cdot 6/2 = 21$), aunque prácticamente se satura para $N = 15$.

En la práctica, cabría la posibilidad de alcanzar un factor de diezmado aún mayor si delimitásemos el ancho espectral de las señales de interés de forma previa al proceso de muestreo, a modo de filtro *anti-aliasing*. Dicho ancho puede seleccionarse mediante el uso de *filtros interferenciales* colocados a la entrada del interferómetro, de forma que la señal



(a) Comparativa entre el espectro original y el procesado para el ancho de banda espectral de interés.



(b) Detalle de la figura anterior, donde se aprecia la reducción del nivel de ruido en la línea base.

Figura 7.8: Resultado del algoritmo de recombinación para la medida experimental de un quemador de metano estabilizado, representación del espectro obtenido para un píxel de la zona central de la llama para $FD_{max} = 7$.

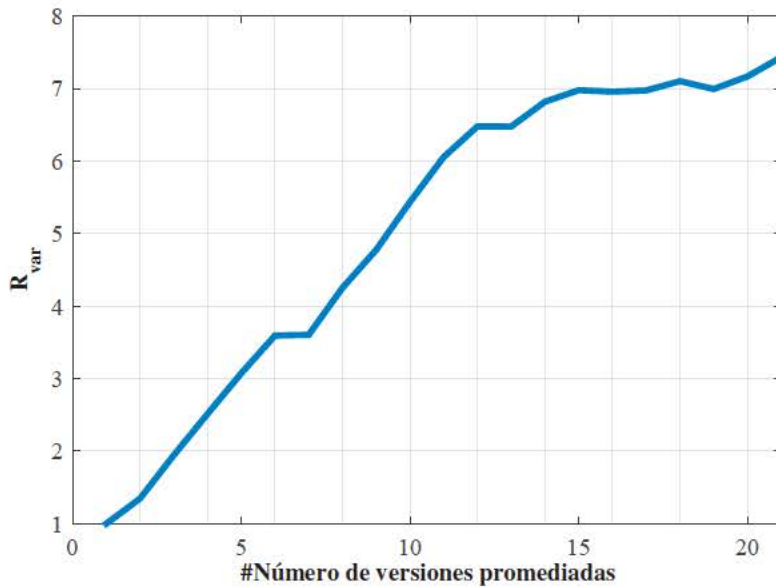


Figura 7.9: Cálculo de la función R_{var} en el ancho espectral comprendido entre 2450 y 2600 cm^{-1} .

muestreada esté previamente delimitada espectralmente.

Por último, hay que resaltar que el procedimiento propuesto depende en gran medida de la distribución espectral del ruido presente. En nuestro caso, la mayor parte de detectores IR que emplearemos están precisamente limitados por ruido de carácter térmico, lo que les convierte en posibles candidatos para su aplicación dado que este ruido responde con buena aproximación al modelo AWGN.

PARTE IV:

APLICACIÓN AL CAMPO DE LA
METROLOGÍA

Medida de la temperatura en procesos de combustión

La parte de la memoria que iniciamos con el presente capítulo describe la aplicación de un buen número de las técnicas desarrolladas en esta tesis a un problema metrológico complejo, como es la medida de la temperatura alcanzada en procesos de combustión. Y es que a día de hoy las técnicas más empleadas en dicha tarea son propensas a incurrir en grandes tasas de error. A modo de ejemplo, el uso de termopares puede llegar a acumular errores de cientos de grados [76], debidos al efecto de *enfriamiento* que producen sobre los gases debido a la baja capacidad calorífica de estos. Pese a ello, su uso sigue siendo extensivo en un gran número de aplicaciones industriales, como la realización de ensayos a fuego, el desarrollo de motores y turbinas o múltiples procesos de fabricación.

Recientemente, y dada su importancia, este problema ha sido abordado en el marco del proyecto europeo 14IND04 EMPRESS (*enhanced process control through improved temperature measurement*) [90] perteneciente al programa EMRP (*European Metrology Research Programme*). Colaboran un total de 18 socios, entre los que se incluyen tanto empresas del sector como los diferentes centros de metrología de cada uno de los países participantes, y de los cuatro paquetes de trabajo abordados, uno de ellos se ocupa de la validación de diferentes técnicas de medida para la determinación de la temperatura en llamas así como para el establecimiento de un patrón de calibración, denominado como llama estándar.

El desarrollo de un llama de referencia (que asegure una correcta reproducibilidad, además de ser portable) permite tanto la intercomparación de distintos principios de medida como la generación de procedimientos que permitan dotar de trazabilidad a las técnicas actuales. En términos cuantitativos, uno de los objetivos de este proyecto contempla la reducción de la incertidumbre en la medida en al menos un orden de magnitud, equivalente a alcanzar niveles de precisión cercanos al 1 % para las temperaturas (medidas en K). Las técnicas comparadas abarcan desde metodologías basadas en *scattering Rayleigh* junto al uso de fuentes láser [122], como otras basadas en el mezclado de ondas (*degenerate four-wave mixing*) sobre *OH* [68], la espectroscopia de emisión en las regiones ultravioleta y visible [46], así como, finalmente, la espectrometría de imagen en infrarrojo medio [98].

El estándar de llama desarrollado consiste en un quemador de tipo Hencken [65] (ver fotografías dispuestas en la figura 8.1), alimentado con metano (CH_4 , con una concentración del 95 %) y aire comprimido mediante controladores de flujo másico que regulan la relación de mezcla, alcanzándose temperaturas estimadas del orden de 2400 K. Una de sus características más representativas es la capacidad para conseguir combustiones

en las que la distribución espacial de la temperatura es prácticamente uniforme, lo que le convierte en una arquitectura idónea para los objetivos de este proyecto, puesto que permite la intercomparación de aquellas técnicas cuyas medidas integren la totalidad del camino óptico. Además, está dotado de una entrada adicional de nitrógeno (N_2) que se utiliza como un co-flujo que “envuelve” la combustión de forma que permite reducir la intensidad de las fluctuaciones temporales.

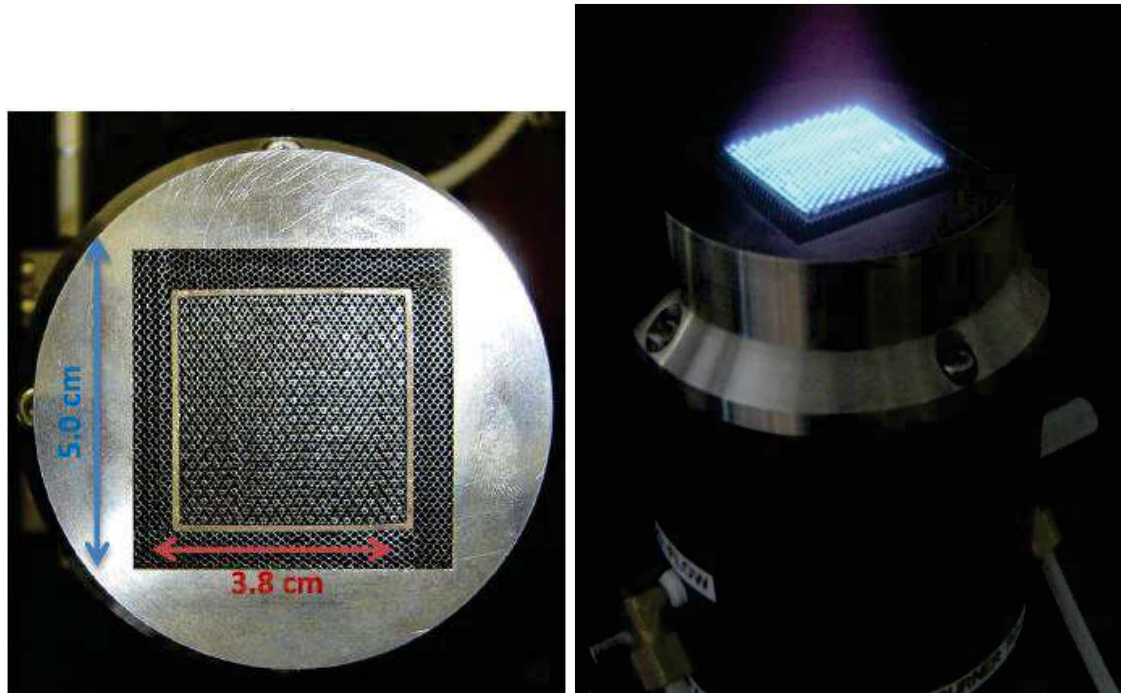


Figura 8.1: Diferentes vistas del quemador tipo Hencken que se empleará en el proyecto EMPRESS, propiedad del National Physics Laboratory. Ilustración adaptada de [90].

Sin embargo, antes de realizar medidas sobre la llama estándar (la cual sólo estará disponible por un tiempo limitado en cada centro de investigación), es necesario que pongamos a punto tanto la estrategia de medida como la instrumentación empleada; lo cual será el objetivo principal de este capítulo. Para ello, partiremos de simulaciones radiométricas que nos permitan reproducir la radiación infrarroja emitida por una combustión en base a sus componentes mayoritarios (fundamentalmente CO , CO_2 y agua), y adaptaremos el sistema de imagen hiperespectral FIRST-MW para la medida de un fenómeno tan energético en base a ensayos preliminares con llamas de alta temperatura.

El presente capítulo comienza presentando la metodología de medida que emplearemos para seguidamente describir cada una de sus etapas, detallando como se han particularizado algunas de las técnicas ya presentadas en este trabajo. Continuaremos esta descripción hasta tratar los efectos asociados a las fluctuaciones temporales presentes en la mayor parte de procesos de combustión. En las medidas de tipo interferométrico, como es nuestro caso, la búsqueda de un método de corrección, que ponga remedio a los problemas causados por la falta de estabilidad temporal, nos lleva a realizar un breve paréntesis en nuestra descripción, para abordar así un análisis más detallado de este fenómeno a lo

largo del capítulo siguiente. Tras esto, retomaremos la metodología de medida descrita en el capítulo actual, ya lista para ser aplicada en medidas experimentales representativas de una llama estándar, exponiéndose los resultados obtenidos en el capítulo 10 de este trabajo.

8.1. Estrategia de medida: espectroscopia de emisión FTIR

El análisis de combustiones mediante espectroscopia de emisión constituye una estrategia de medida que ha sido históricamente empleada [113], y que puede aplicarse en diferentes regiones del espectro electromagnético, propiciando por tanto la aparición de diferentes técnicas de medida en función de las especies de interés y el fenómeno bajo estudio. En nuestro caso particular, nos centraremos en la medida de combustiones basadas en hidrocarburos, de forma que entre los componentes gaseosos mayoritarios se encuentren el CO_2 , agua y el monóxido de carbono, al margen de otros subproductos como óxidos de nitrógeno, hidrocarburos inquemados o compuestos orgánicos. Todos ellos presentan firma espectral en la banda infrarroja del espectro, y especialmente en la región del infrarrojo medio, y dadas las elevadas temperaturas que típicamente se alcanzan (de más de $1000^\circ C$), la radiación emitida por las especies presentes puede emplearse no sólo para estimar la componente térmica sino para el análisis cuantitativo de su composición [98].

Comenzaremos la descripción del problema desde un punto de vista radiométrico, para lo que nos apoyaremos en el esquema de la figura 8.2, aunque antes es necesario establecer las siguientes consideraciones:

- Dado que la región de operación se corresponde con el infrarrojo medio (lo que implica longitudes de onda relativamente largas), es posible despreciar los efectos debidos al *scattering* de materia particulada, y considerar únicamente las componentes de absorción y emisión de los compuestos gaseosos en las ecuaciones de transferencia radiativa.
- Asumiremos que la llama se encuentra bajo la condición de equilibrio termodinámico local (o LTE), descrita en el capítulo 2.
- Se supondrá que tanto la temperatura como la concentración de cada especie, dentro del campo de visión de cada píxel (iFOV) se distribuye de forma homogénea. Esta asunción es razonable en el caso de la llama estándar desarrollada en el proyecto, ya que ésta presenta un perfil de temperatura espacial aproximadamente plano en la mayor parte de la zona de combustión, si exceptuamos los efectos de borde. En otras situaciones, será conveniente que revisemos esta premisa, para estimar los errores introducidos por esta simplificación.

Bajo estas condiciones, el modelo radiométrico no dista mucho del desarrollo que llevamos a cabo en el capítulo 2, y puede obtenerse fácilmente sin más que acudir a la expresión 2.16. Además, también es razonable suponer que la radiancia proveniente del fondo (\mathcal{L}_0) es despreciable frente a la emisión del volumen de gases calientes, lo que simplifica aún más la expresión de la radiancia detectada $\mathcal{L}_{det}(\nu)$ hasta alcanzar la siguiente ecuación:

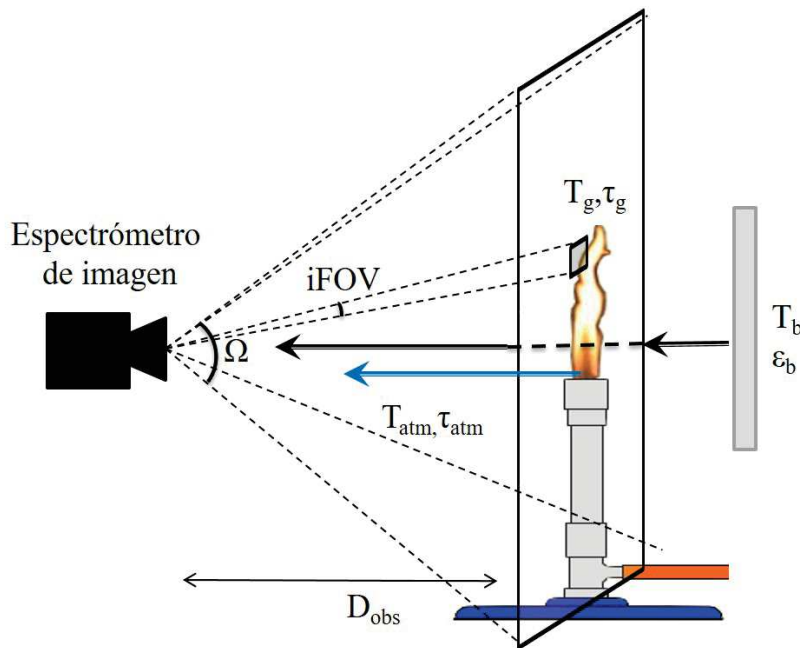


Figura 8.2: Modelo radiométrico de la emisión procedente de una combustión controlada, caracterizada por su temperatura T_g y su transmitancia τ_g .

$$\mathcal{L}_{det}(\nu) = \mathcal{L}_{CN}(T, \nu) \cdot \varepsilon(\nu) \cdot \tau_{atm}(\nu) \quad (8.1)$$

donde la emisividad de la llama $\varepsilon(\nu)$ depende de tanto la temperatura a la que ésta se encuentre como de las concentraciones de las especies presentes, dado que $\varepsilon(\nu) = 1 - \tau_g(\nu) = 1 - \exp(-\sum_i \kappa_i(T, \nu) \cdot Q_i)$. Analizando la ecuación 8.1, se observa una alta dependencia entre la radiancia detectada y la temperatura, propiciada por la ley de Planck ($\mathcal{L}_{CN}(T, \nu)$). Por esta razón este método presenta una elevada sensibilidad frente a las variaciones de temperatura, por motivos similares a los que han contribuido a que la región IR haya sido explotada por aplicaciones termográficas.

Sin embargo, y al igual que en los casos estudiados en el capítulo 5, para obtener la temperatura es necesario estimar también la emisividad de cada compuesto, a través de su densidad de columna Q_i . Como explicábamos en el capítulo 2, la relación entre la temperatura y la radiancia detectada no es unívoca, y es necesario seleccionar una estrategia que nos permita deshacer la ambigüedad existente entre las variables T y Q , al igual que discutimos en los capítulos 5 y 6. En ese caso, la metodología propuesta fue validada en medidas activas, ya que la emisión proveniente de los gases calientes era menor que la que podía conseguirse con un cuerpo negro convencional de los disponibles en el laboratorio. Sin embargo, ahora trataremos con combustiones altamente energéticas que pueden llegar a superar los 2400°C , lo que dificulta enormemente el anterior planteamiento. En su lugar, resulta más adecuado emplear la propia emisión de la llama para llevar a cabo su caracterización; lo que conlleva trabajar con la energía radiada por ésta en términos absolutos, a diferencia de las estimaciones de la transmitancia del capítulo 5. En ese caso no necesitábamos traducir las medidas realizadas a magnitud radiométrica alguna, como

es el caso de la radiancia, mientras que ahora la calibración radiométrica se convierte en un proceso indispensable para poder interpretar la firma espectral emitida, y caracterizar así la llama.

De forma análoga al problema de cuantificación tratado en el capítulo 5, propondremos un modelo de ajuste iterativo de la radiancia detectada mediante espectros sintéticos, simulados de forma que incluyan los efectos instrumentales. Este proceso se puede resumir en la minimización (mediante un algoritmo de optimización similar al que describíamos en el capítulo 5) de la suma de errores cuadráticos entre espectros experimentales y simulados, en función de las variables temperatura y densidad de columna para cada especie, y a lo largo de un ancho espectral dado.

En particular, hemos seleccionado para el ajuste las bandas de emisión correspondientes al dióxido de carbono (de 2200 a 2380 cm^{-1}) y al monóxido de carbono (de 1950 a 2250 cm^{-1}). Y como variables de salida, el algoritmo nos proporciona de forma simultánea la temperatura, compartida por ambas especies (CO_2 y CO), la cantidad de moléculas de gas de cada una de ellas expresada en $\text{ppm} \cdot \text{m}$ (Q_{CO_2} y Q_{CO}), y la concentración del dióxido de carbono presente en el ambiente ($Q_{\text{CO}_2, \text{amb}}$).

8.2. Metodología de recuperación de la temperatura

Poner en práctica el proceso de ajuste iterativo que hemos descrito requiere implementar una secuencia completa de procesado, tanto en el dominio experimental como en el apartado correspondiente a la simulación teórica, de forma que permita la comparación entre la radiancia medida $\mathcal{L}_{\text{exp}}(\nu)$ y la simulada $\mathcal{L}_{\text{sim}}(\nu)$. Gráficamente, la secuencia de operaciones propuesta se ha representado en el diagrama de flujo de la figura 8.3, donde el procedimiento descrito se efectuaría para cada uno de los píxeles que forman la imagen hiperespectral.

La rama experimental (correspondiente a la secuencia de la izquierda en el diagrama de flujo) comienza con la adquisición de interferogramas mediante el sistema de imagen hiperespectral FIRST-MW. Estos, como ya hemos adelantado en la introducción al capítulo, presentan fluctuaciones temporales que es necesario corregir, tal y como se explicará en el capítulo 9. Hecho esto, el siguiente paso es la obtención de espectros, lo que incluye las técnicas de procesado descritas en el capítulo 4, como es la corrección de fase, el uso de *padding*, la apodización y la corrección del eje óptico. Tras ello, todavía es posible mejorar la calidad de los espectros obtenidos si aplicamos algunas de las técnicas mostradas en el capítulo 6 (como el filtrado por componentes principales) y el 7 (como el promediado de espectros obtenidos por diezmado). Finalmente, el último paso consiste en traducir los espectros resultantes a unidades de radiancia ($\text{W}/\text{m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}$), mediante una etapa de calibración radiométrica, obteniéndose lo que hemos denominado $\mathcal{L}_{\text{exp}}(\nu)$.

En su contrapartida teórica, el proceso comienza con la modelización de la dependencia con la temperatura en los coeficientes de absorción ($\kappa(\nu)$) de CO y CO_2 . Para ello se recurre a la generación de simulaciones de dichos coeficientes a partir de bases de datos espectroscópicas, que contienen los parámetros de moléculas para temperaturas superiores a los 1000°C, y así parametrizar la influencia con la temperatura. Con los coeficientes de absorción de cada especie se construye el modelo de transferencia radiativa (LBLRTM) correspondiente a la expresión 8.1, y que simula la radiancia incidente en el detector. El

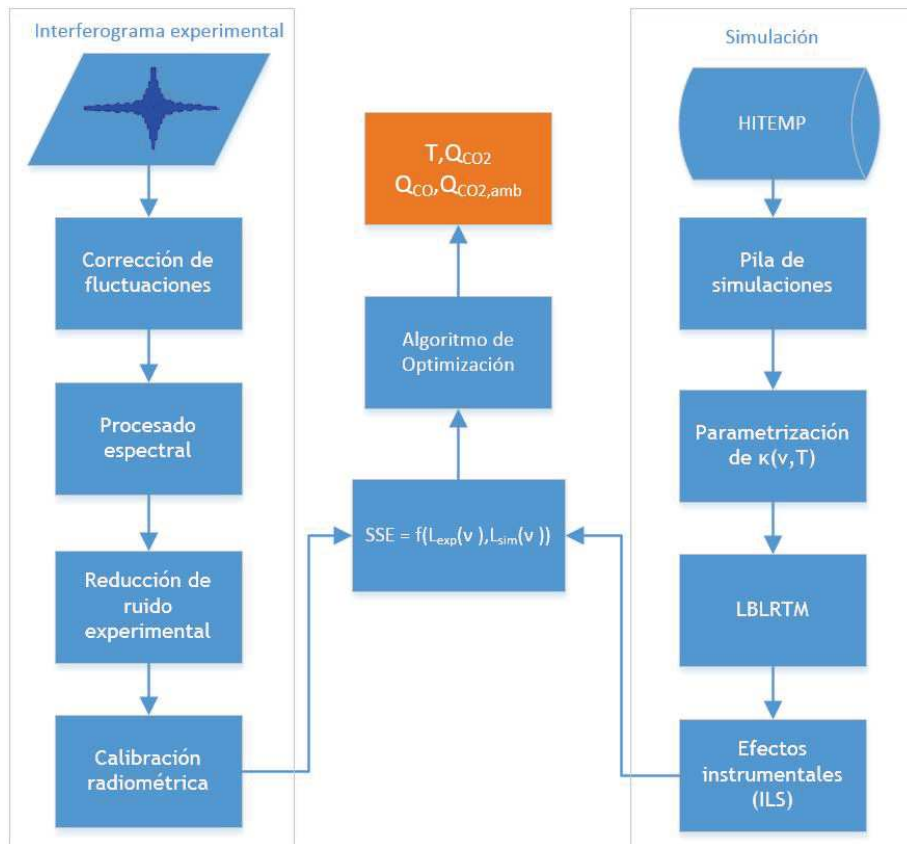


Figura 8.3: Secuencia de procesamiento para la obtención de espectros experimentales y sintéticos, en los que se basa la metodología de obtención de la temperatura de llamas propuesta.

último paso consiste en incluir los efectos instrumentales, de forma equivalente a como ya hicimos en el capítulo 4, aplicando la *Instrumental Line Shape* experimental sobre los espectros teóricos $\mathcal{L}_{sim}(\nu)$ para que estos puedan compararse con los experimentales $\mathcal{L}_{exp}(\nu)$.

La recuperación de la temperatura, junto a los subproductos correspondientes a la cantidad de gas de CO y CO_2 así como su concentración ambiente, se obtiene mediante el ajuste iterativo entre $\mathcal{L}_{sim}(\nu)$ y $\mathcal{L}_{exp}(\nu)$, minimizándose la suma del error cuadrático en la región de ajuste. A continuación, durante las siguientes secciones pasaremos a describir las etapas de procesamiento más relevantes de entre las contempladas en el diagrama de la figura 8.3.

8.2.1. Modelado de coeficientes de absorción a alta temperatura

Las especies mayoritarias (CO_2 , CO y H_2O , fundamentalmente) presentan una firma espectral intensa en el infrarrojo medio, y su comportamiento radiométrico se puede modelar a través de su coeficiente de absorción $\kappa(\nu, T)$, función de la temperatura y la longitud de onda. De forma análoga a como procedimos en el capítulo 5, la dependencia con la temperatura para cada número de onda se modela a través de una aproximación polinómica de orden variable.

Se parte de un conjunto de simulaciones que cubren el rango de temperaturas comprendido entre 300 K y 3000 K , en intervalos de 50 K . Estas son obtenidas a partir de la base de datos espectroscópicos HITEMP-2010 [108], en las que se ha seleccionado un perfil de ensanchamiento de tipo Voigt. Para seleccionar el orden del polinomio más adecuado hemos considerado el grado de acuerdo entre las simulaciones de HITEMP y nuestra aproximación para una temperatura de referencia de 2350 K . A modo de ejemplo, en la figura 8.4 se compara, para el caso de CO_2 , el resultado obtenido mediante un polinomio de orden 9, que ha sido el valor finalmente seleccionado. Cuando este mismo proceso fue llevado a cabo sobre los datos de absorptividad del capítulo 5, el grado necesario fue mucho menor, debido fundamentalmente a que cubríamos entonces un intervalo de temperatura mucho más corto.

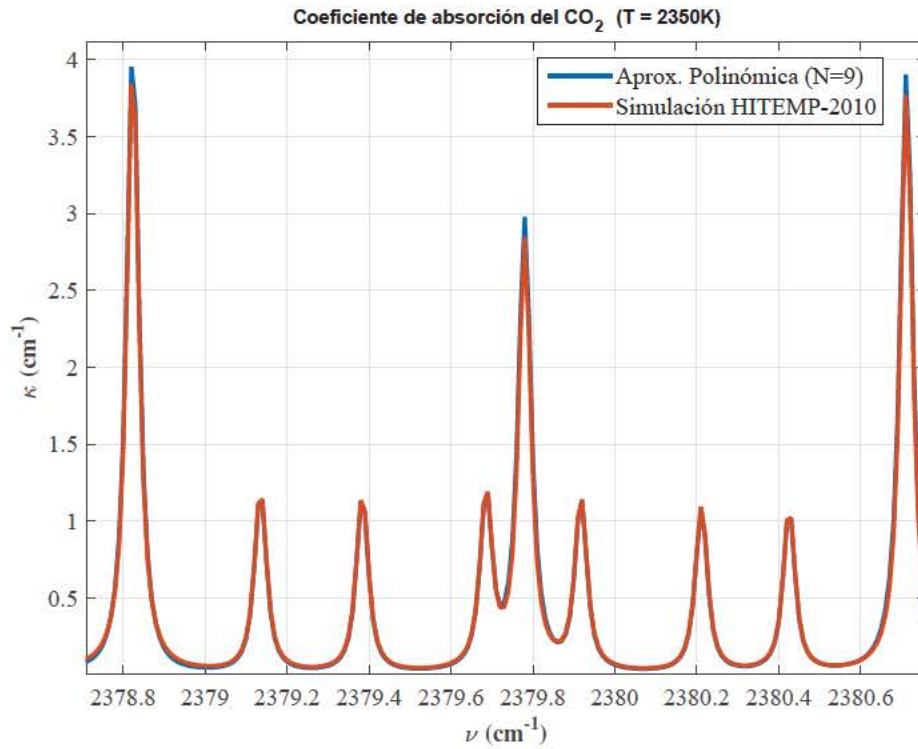


Figura 8.4: Comparación del coeficiente de absorción del CO_2 obtenido con HITEMP frente al resultante de modelar su dependencia con la temperatura a partir de funciones polinómicas para cada línea espectral, para el caso de $T = 2350\text{ K}$.

8.2.2. Calibración radiométrica de llamas

Como ya se ha explicado, al trabajar en el *modo de emisión* será necesario obtener una medida absoluta de la radiancia espectral detectada. Esto implica calibrar nuestras medidas experimentales en términos de la radiancia incidente en el detector, para lo que recurriremos al uso de cuerpos negros de temperatura controlable como patrones de referencia, siguiendo un procedimiento similar al descrito en la sección 4.4.1.

Sin embargo, en el caso particular de la radiancia proveniente de una combustión se nos plantean ciertas dificultades adicionales con respecto al caso estándar ya tratado. Por un lado, existe una dificultad inherente al tratar de obtener los parámetros de calibración en la región del dióxido de carbono. Dado que éste se encuentra presente en la atmósfera, su firma aparecerá en ambos espectros de referencia (que denotábamos como $S_c(\nu)$ y $S_h(\nu)$), y se trasladará fundamentalmente a $G(\nu)$, dando lugar a indeterminaciones en aquellas zonas en las que las líneas de absorción sean tan intensas que la radiancia detectada quede próxima a cero. Puesto que el CO_2 es uno de los gases mayoritarios de nuestro problema, hemos optado por emplear la solución propuesta en [10]. Esta alternativa se basa en la baja dependencia espectral que presenta $G(\nu)$, y que puede aproximarse de forma razonable a lo largo de la región característica del CO_2 por una función polinómica calculada sobre las regiones adyacentes. De esta forma, es posible construir una línea base de ganancia espectral que pueda ser aplicada en la región de mayor absorción del dióxido de carbono, descontando así su influencia.

Por otro lado, dado que las temperaturas alcanzadas se prevé que excedan los $1500^\circ C$, otro de los inconvenientes al que tendremos que hacer frente consiste en seleccionar de forma adecuada las referencias de calibración. A primera vista parecería necesario emplear cuerpos negros cuya temperatura superase los $1500^\circ C$, lo que plantearía graves dificultades. En primer lugar, este tipo de instrumentación resulta en gran medida cara y compleja, aunque podemos encontrarla disponible en organismos tales como el Centro Español de Metrología. Pero, en segundo lugar, aún disponiendo de equipos con dichas prestaciones, estos producirían una cantidad total de radiancia integrada que sobrepasaría los límites de operación de nuestro sistema de medida.

En este punto debemos caer en la cuenta de que la radiancia producida por la llama se limita a aquellas regiones en las que las especies que la componen presentan firma espectral, siendo la radiancia total integrada mucho menor que la producida por un cuerpo negro a la misma temperatura. Esta circunstancia va a permitir que pueda calibrarse con cuerpos negros a temperaturas muy inferiores a las de la llama.

Para abordar convenientemente la mejor estrategia de calibración, resulta indispensable que recordemos el proceso de formación de la señal interferométrica (ver capítulo 4), dado que, aunque puede resultar más intuitivo acudir al dominio espectral, es en este otro donde tiene lugar en primera instancia el proceso físico de calibración que intentamos modelar, y donde hay que asegurar la condición de linealidad. Obteníamos que la expresión 8.2 que relacionaba la señal interferencia $I(x)$ y su distribución espectral $\mathcal{L}_{det}(\nu)$ venía dada por:

$$I(x) = \int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}_{det}(\nu) \cdot (1 + \cos 2\pi x\nu) d\nu \quad (8.2)$$

En la posición correspondiente al ZPD ($x = 0$), $I(0)$ representa la radiancia total integrada por el detector, y el valor máximo alcanzable por el interferograma. Por lo tanto, resulta un buen indicador del límite superior a partir del cual el sistema podría comportarse de forma no lineal. Ante esta situación, es necesario considerar toda la radiancia integrada por el detector en las medidas de calibración a fin de garantizar que éstas cubren todo el rango dinámico de los interferogramas medidos en la llama [98]. Dado que disponemos de un simulador radiométrico, es posible estimar las temperaturas de cuerpo negro que

proporcionarían una radiancia total equivalente, en términos de radiancia integrada, a la de una llama como la descrita en el proyecto EMPRESS, con $T = 2400K$, $3,8\text{ cm}$ de espesor y concentraciones de $CO_2 = 10\%$ y $CO = 4\%$. Con estos datos, una aproximación de primer orden de la radiancia total incidente en la banda IR ($BW = 5500 - 1800\text{ cm}^{-1}$) vendría dada por:

$$I_{llama}(0) = \int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}_{CN}(2400\text{ K}, \nu) \cdot (1 - \tau_g) d\nu \approx 4000 \frac{W}{m^2 \cdot sr} \quad (8.3)$$

En la que no hemos considerado pérdidas debidas a la atenuación atmosférica. Considerando una emisividad cercana a la unidad, no resulta una tarea difícil seleccionar una dupla de valores tales que proporcionen valores de radiancia integrada adecuados. A modo de ejemplo, si $T_c = 200^\circ C$ y $T_h = 580^\circ C$ se obtendrían los siguientes valores de radiancia integrada:

$$I_{T_c}(0) = \int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}_{CN}(200^\circ C, \nu) d\nu \approx 175 \frac{W}{m^2 \cdot sr} \quad (8.4)$$

$$I_{T_h}(0) = \int_{\langle BW \rangle} \mathcal{L}_{CN}(580^\circ C, \nu) d\nu \approx 5630 \frac{W}{m^2 \cdot sr} \quad (8.5)$$

Ambas radiancias integradas proporcionarían un rango dinámico adecuado para calibrar la radiación obtenida por la llama y la configuración del sistema (tiempos de integración, uso de diafragmas, etc.). En la gráfica de la figura 8.5 se comparan las radiancias espectrales estimadas para la llama estándar y las medidas de calibración. Pese a que, en el caso de la llama, toda la energía se concentre en un rango espectral muy estrecho, produciendo una densidad espectral de potencia muy alta, esto no supondría pérdida de linealidad en el detector IR.

8.2.3. Filtrado de ruido mediante componentes principales

Al margen de las técnicas de procesado más clásicas, como la realización de promedios temporales y/o espaciales, puede ser de provecho aplicar técnicas más sofisticadas como aquellas que se proponían en la sección 6.2, basadas en la proyección sobre subespacios adaptados a nuestra señal, de forma que un número reducido de componentes (principales) sintetice toda la información contenida en el espectro, a la vez que aquellas componentes debidas fundamentalmente al ruido fueran sustraídas. De entre las alternativas que se presentaban para la construcción de dicha base de autovectores (que denotábamos por **H**), esta etapa se correspondería con lo que denominábamos *caso 2*, en la que se seleccionarían los espectros experimentales **D** mediante una clasificación previa de la imagen de partida, de forma que no se incluyeran píxeles con comportamientos dispares, como aquellos procedentes del fondo, sino sólo aquellos pertenecientes a la combustión.

A partir de este subconjunto **D** de píxeles, calculamos la base de componentes principales mediante su descomposición en valores singulares, y seleccionamos únicamente las primeras $P = 5$ componentes ya que permiten explicar la práctica totalidad de la variabilidad en la llama. Con esto ya estaría construida nuestra base de autovectores (**H**) (ver capítulo 6), sobre la que proyectaremos los espectros experimentales, obteniéndose una

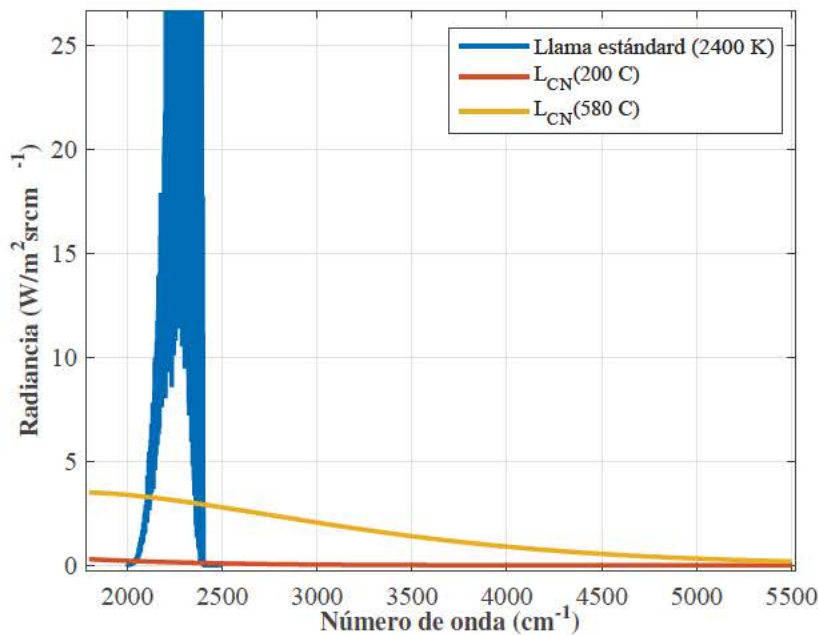


Figura 8.5: Comparación de la radiancia espectral estimada para la llama estándar y las temperaturas de calibración seleccionadas (200 y 580°C).

representación en un espacio de dimensionalidad reducida. En este proceso el ruido asociado a las componentes principales de mayor orden sería sustraído, y si queremos volver a disponer de nuestros datos en el espacio original, no tendríamos más que proyectar nuevamente sobre la matriz de cambio de base traspuesta \mathbf{H}^T .

8.2.4. Inestabilidad temporal: *flickering* y fluctuaciones de alta frecuencia

Con respecto al apartado experimental, comenzaremos realizando pruebas mediante una llama preliminar, compuesta por un quemador de tipo Bunsen alimentado por gas butano convencional. Tras un primer análisis encontramos que los interferogramas adquiridos presentan una modulación temporal ocasionada por las fluctuaciones de la fuente, en este caso, la combustión del mechero Bunsen. Dada la velocidad de barrido del espejo, de $v_{mich} = 0,1 \frac{cm}{s}$ para una ROI de 120×100 píxeles, y considerando un periodo de muestreo igual a $\lambda_{HeNe} = 632,8nm$, nuestro sistema de imagen hiperspectral presenta en la práctica prestaciones similares a las de cámaras de adquisición ultra rápida, con una frecuencia de adquisición del orden de 1300 fps, lo que permite captar y analizar dichas variaciones. En la gráfica de la figura 8.6 se muestra un ejemplo del fenómeno que describimos. En ella, la vista ampliada permite visualizar el marcado carácter sinusoidal de la modulación externa, que alcanza a distorsionar el interferograma por completo.

Si obtenemos el espectro correspondiente a dicho interferograma, observamos la distribución espectral mostrada en la figura 8.7. Al margen de la componente de continua, encontramos dos regiones en las que se concentra la práctica totalidad de la energía. Por

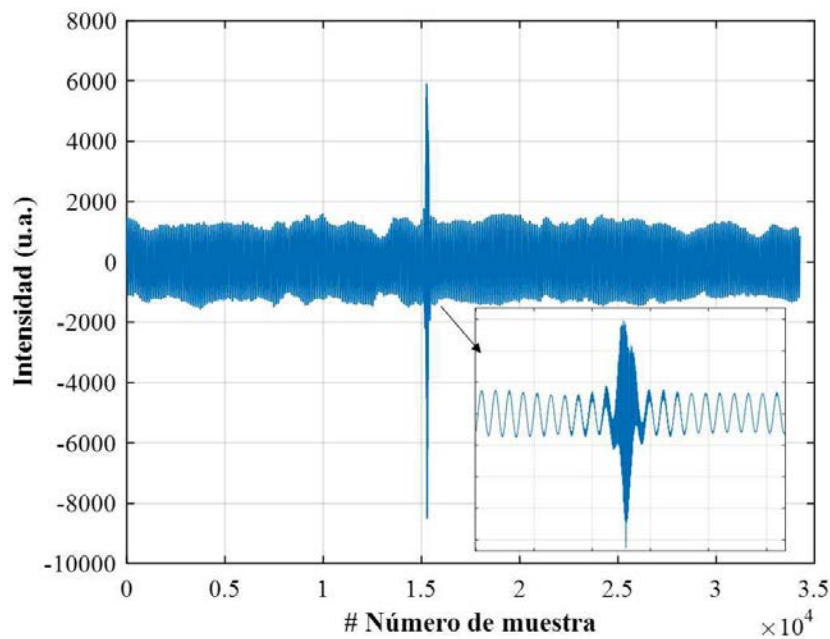


Figura 8.6: Ejemplo de interferograma adquirido en un quemador de tipo Bunsen, al que se le ha sustraído la componente asociada al offset instrumental.

un lado, aparece el espectro característico de emisión de la llama en la región del infrarrojo medio, y, por otro, una alta densidad espectral de energía concentrada en las inmediaciones de $\nu \approx 150 \text{ cm}^{-1}$. Sin embargo, el detector infrarrojo (InSb) presenta una respuesta similar a un filtro paso banda cuya frecuencia de corte inferior es de $\nu_{\text{cut}} = 1800 \text{ cm}^{-1}$, por lo que esta segunda distribución espectral no proviene de una señal de naturaleza óptica, sino que más bien se trata de un efecto inducido por las fluctuaciones temporales que se dan durante el barrido del espejo. Esto es, las variaciones temporales se traducen en frecuencias espaciales con el movimiento del espejo, y éstas son interpretadas como frecuencias espectrales por la transformada de Fourier. De hecho, sólo con la velocidad del espejo resulta sencillo obtener a qué frecuencia temporal se correspondería la frecuencia espacial observada de 150 cm^{-1} , siendo esta de $f = v_{\text{mich}} \times \nu = 0,1 \frac{\text{cm}}{\text{s}} \times 150 \text{ cm}^{-1} = 15 \text{ Hz}$.

Además, si observamos con más detenimiento la vista ampliada de la emisión del CO_2 dentro de la figura 8.7, y, en concreto, la región entre 2400 y 2600 cm^{-1} , encontramos que la firma espectral no se corresponde con la que esperaríamos. De hecho, ese rango espectral debería estar exento de radiación, ya que el dióxido de carbono no presenta ningún pico de emisión en dicha banda, lo que nos lleva a valorar el hecho de que el espectro contenga artefactos propiciados por las fluctuaciones observadas.

La frecuencia de corte del detector IR nos proporciona un criterio sencillo para clasificar las componentes del interferograma mediante su distribución espectral: todas aquellas por debajo de la frecuencia de corte sólo pueden corresponderse con variaciones temporales interpretadas erróneamente, y por encima de ésta, bien se deberían a las modulaciones propias del interferómetro sobre la señal óptica o bien son fluctuaciones de alta frecuencia. Siguiendo esta clasificación hemos obtenido las imágenes que se muestran en la figura

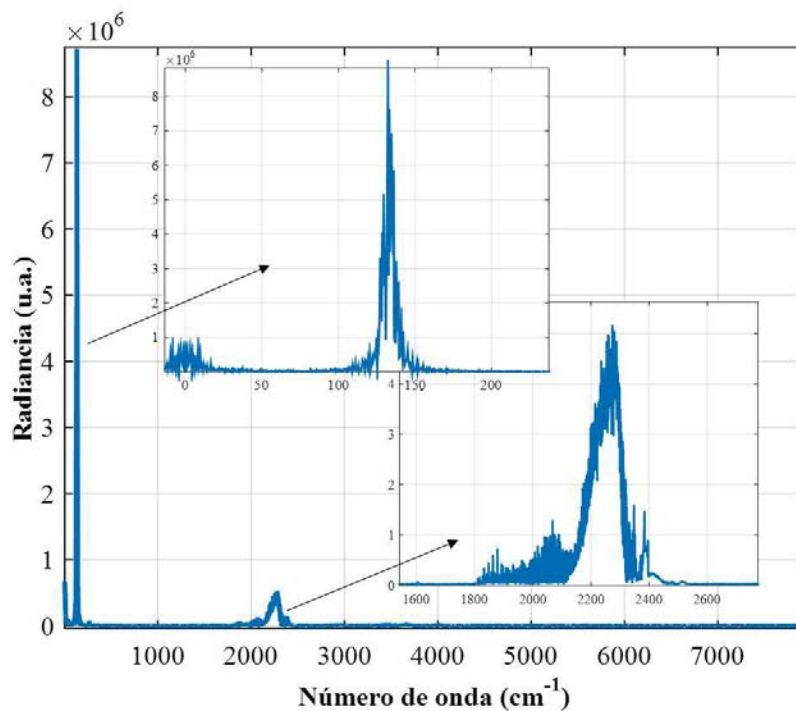


Figura 8.7: Análisis espectral del interferograma mostrado en la figura 8.6, en el que se muestran ampliadas las porciones correspondientes a las fluctuaciones temporales y a las señales ópticas.

8.8, correspondientes a la desviación estándar de las componentes de alta y baja frecuencia del interferograma para cada píxel. Analizando la distribución espacial de dichas imágenes de forma conjunta con los espectros obtenidos, es posible distinguir dos fuentes de fluctuaciones temporales:

- *Flickering*. Correspondiente al parpadeo que, incluso a simple vista se distingue en gran parte de las llamas de difusión. Este fenómeno está producido por la fricción entre los gases calientes ascendentes, producto de la combustión, y la propia atmósfera, generándose una pulsación natural de baja frecuencia [74, 72]. Dicho efecto tiene un gran impacto en el interferograma, puesto que un porcentaje nada desdeñable de la energía radiada fluctúa durante el barrido del interferómetro, introduciendo una modulación temporal del orden de la decena de hercios (15 Hz en nuestro caso). Aunque no se refleje en la imagen, dicha frecuencia varía ligeramente para cada píxel, en función de su posición con respecto a la base, debido a la aceleración de los gases, que provoca cambios en su velocidad de ascenso.
- *Fluctuaciones de alta frecuencia*. Son debidas a las turbulencias que se producen en la salida del gas combustible, y por ello se concentran en la base de la llama, como se observa en la figura 8.8, en la región denominada de pre-mezcla. Estas fluctuaciones presentan un alto grado de aleatoriedad, por lo que se corresponden con una anchura espectral muy amplia y no con una frecuencia bien definida, solapándose con la señal propia de la interferencia óptica. De hecho, ha sido necesario recurrir

al uso de un sistema de imagen de banda integrada y alta velocidad de adquisición (> 500 fps) en el infrarrojo medio para garantizar que las fluctuaciones observadas tienen un origen exclusivamente temporal, y así distinguirlas de la señal interferométrica. La presencia de este tipo de perturbaciones supone una fuerte interferencia en la señal de interés y deteriora en gran medida los espectros obtenidos (tal y como se observa en la figura 8.9).

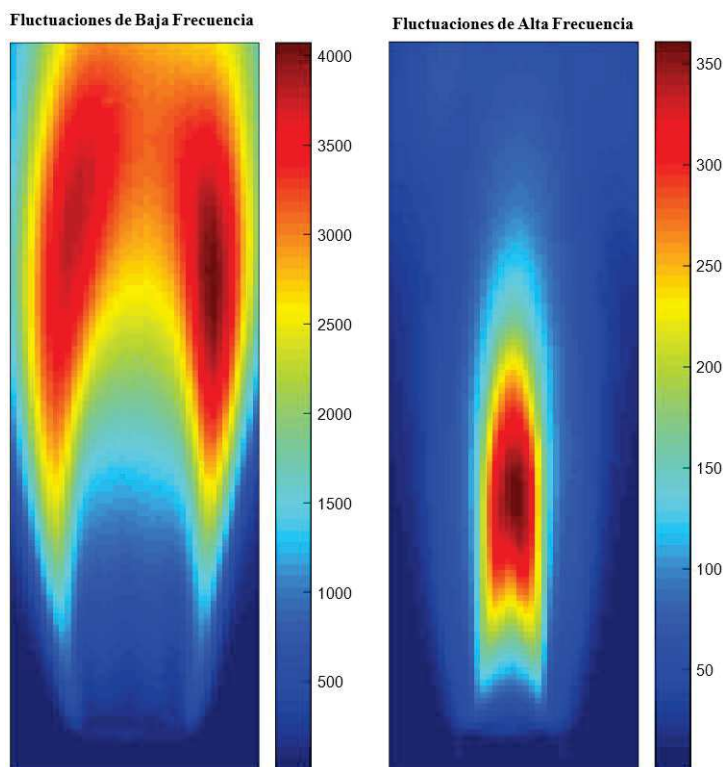


Figura 8.8: Distribución espacial de las fluctuaciones temporales en un quemador de tipo Bunsen. A la izquierda, imagen de la desviación estándar de las componentes del interferograma de baja frecuencia, esto es, por debajo de la frecuencia de corte del detector, $\nu_{cut} = 1800 \text{ cm}^{-1}$. A la derecha, imagen de la desviación estándar de las componentes del interferograma de alta frecuencia, por encima de ν_{cut} .

Este último tipo de fluctuaciones resulta extremadamente complejo de eliminar, dado que espectralmente coinciden con la interferencia óptica que tratamos de medir. Tras aplicar técnicas de reducción de ruido, como el algoritmo de recombinación de muestras descrito en el capítulo 7, obtenemos una cierta mejoría (véase la figura 8.9) pero no llegan a alcanzarse resultados lo suficientemente buenos como para que puedan recuperarse valores razonables de temperatura y densidad de columna. Por ello, hemos optado por paliar este efecto modificando el flujo de butano mediante un filtro formado por lana de acero situado entre la entrada de aire y la boca del mechero Bunsen, y que produce un caudal más estable gracias a la eliminación de gran parte de las turbulencias que se producen en la base.

Esta sencilla modificación elimina casi por completo las fluctuaciones de alta frecuencia; sin embargo, no produce ningún efecto sobre las fluctuaciones de baja frecuencia (*flic-*

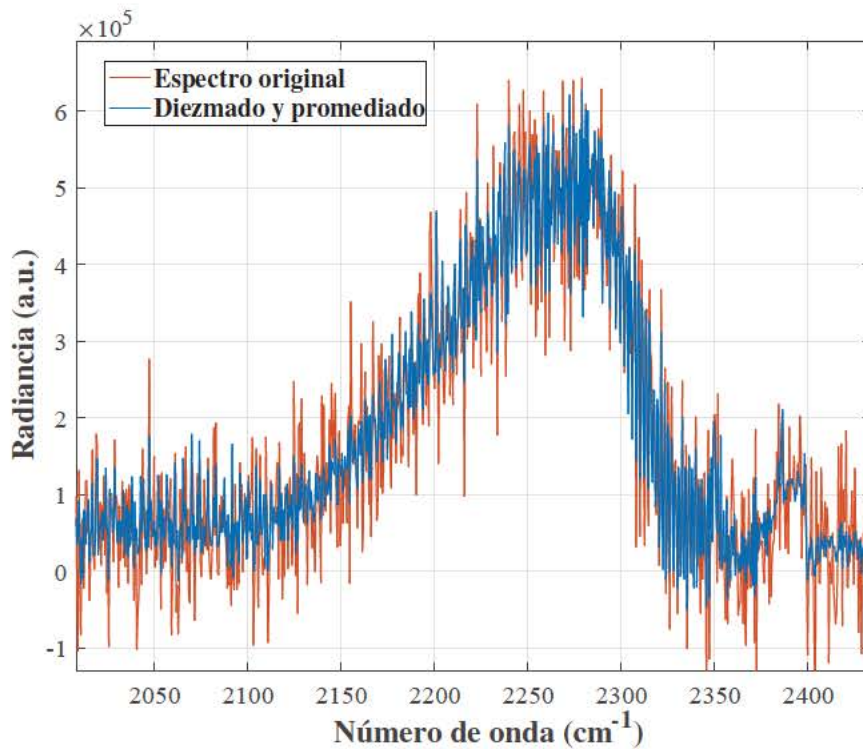


Figura 8.9: Resultado de aplicar el algoritmo de recombinación sobre un interferograma procedente de la región de altas fluctuaciones en un quemador de tipo Bunsen. se compara el espectro original con el obtenido para un factor de diezmado $DF_{max} = 15$.

king), ni tampoco reduce los artefactos espectrales que se observaban en las bandas de emisión características de la llama. Por todo ello, resulta recomendable estudiar con mayor detalle el fenómeno de modulación temporal, y su impacto en la modulación propia del interferómetro, para así corregir aquellas distorsiones que puedan alterar los valores de temperatura recuperados. Dicho análisis se llevará a cabo a lo largo del capítulo siguiente, donde profundizaremos en este problema a través de la discusión de un mecanismo de corrección de fluctuaciones válido para interferometría FTIR.

Corrección de fluctuaciones temporales en espectrometría FTIR

Al presentar el problema de la medida de temperatura en llamas durante el capítulo anterior, anticipamos las dificultades que sobrevienen si medimos una radiación cuya intensidad fluctúa en el lapso de tiempo en el que el interferómetro se desplaza. Sin embargo, esta situación no es exclusiva de la medida de combustiones, y múltiples fenómenos (como derivas térmicas o fluctuaciones en el brillo de la fuente del tipo de las que aparecen en observaciones atmosféricas o astronómicas) pueden suponer una fuente de variabilidad en el interferograma obtenido.

Resulta razonable pensar que dichas alteraciones provocarán artefactos en el espectro generado, y que nuestros resultados se distorsionarán en mayor o menor medida. Por esto, el objetivo de este capítulo es llevar a cabo una descripción teórica y generalizable de este tipo de fenómenos, que nos permita evaluar su impacto, para después acabar proponiendo un algoritmo de corrección que los elimine cuando sea posible.

Comenzaremos nuestro análisis partiendo del proceso de formación del interferograma descrito en el capítulo 4, donde introduciremos las fluctuaciones temporales y obtendremos las condiciones que facilitarían su eliminación. Esta metodología se muestra tanto en un ejemplo teórico (mediante interferogramas simulados) como en casos reales, poniendo especial énfasis en el problema de medida de llamas que nos ocupa.

9.1. Análisis introductorio

Las consecuencias derivadas de las fluctuaciones de brillo de la fuente (*Source Brightness Fluctuations*, SBF) son un problema conocido que ha venido tratándose desde los inicios de la espectrometría FTIR. Una de las primeras soluciones fue descrita en 1958 por Mertz [77] para minimizar el efecto de la escintilación en las observaciones de estrellas, y requería la introducción de un esquema de modulación interno sobre las diferencias de camino óptico entre ambos haces del interferómetro, que posteriormente era necesario demodular y adaptar en una etapa de procesamiento adicional. Dadas las implicaciones que esta técnica ocasionaba en términos de complejidad y prestaciones del equipo de medida, el propio Mertz propuso posteriormente una solución basada en lo que pasaría a conocerse como *rapid scan technique*, donde ya no era necesario emplear una etapa de modulación adicional, y la estrategia consistía en aumentar la velocidad de barrido de forma

tal que las fluctuaciones temporales fueran interpretadas como frecuencias espaciales menores que las que se trataba de medir, siendo así ambas bien diferenciadas y evitándose su solapamiento [78].

Pese a que este nuevo enfoque fue aplicado con éxito en los nuevos diseños que surgieron en esa época (ver [12] y [38]), sólo elimina parcialmente el efecto de las fluctuaciones, porque, como veremos enseguida, estas no se limitan a introducir frecuencias espúreas en el interferograma sino que tienen un efecto multiplicativo mucho más difícil de eliminar. Fueron propuestos varios esquemas que se basaban en utilizar tanto los términos de reflexión como los de transmisión del interferómetro, pero sólo podían aplicarse en instrumentos que dispusieran de dos salidas complementarias y eran extremadamente dependientes de la relación de complementariedad entre ambas salidas, la cual puede verse fácilmente comprometida si consideramos cierto nivel de pérdidas en el uso del *beam splitter* tal y como sugiere Brault en [8].

No es hasta el año 2007 cuando en los trabajos de Keppel-Alleks *et al.* en [61] se propone una nueva metodología de corrección de fluctuaciones partiendo de un interferograma que conserve la componente de continua, el cual es filtrado paso bajo y empleado para ponderar los niveles de la señal de partida. Dichos trabajos estaban orientados a aplicaciones dentro del intervalo espectral del infrarrojo cercano, a partir de detectores de InGaAs y Si, los cuales contienen niveles de radiación interna u *offset* poco significativos. En 2011, Ridders *et al.* en [99] proponen extender la solución ofrecida por Keppel-Alleks *et al.* hacia longitudes de onda mayores, donde se emplean otras tecnologías de detectores infrarrojos como los sensores MCT (que ya habían sido catalogados como *incorregibles* por Griffiths [34] y Rao [96]), y se hace patente la necesidad de contemplar adecuadamente los niveles de *offset* interno del instrumento en el proceso de corrección de fluctuaciones. En concreto, proponen un método para estimar el término de *offset*, habitualmente desconocido, basado en la eficiencia de modulación del interferómetro junto a la obtención del interferograma DC, necesario en la corrección, a partir del suavizado del interferograma original, en contraposición al método de Keppel-Alleks que llevaba a cabo el proceso de filtrado en el dominio de Fourier.

La metodología aquí expuesta es un intento de presentar un análisis pormenorizado del problema, realizando una descripción completa que tome en consideración todos los términos involucrados. Esto permitirá comprender los trabajos desarrollados hasta este momento y proporcionar el conocimiento necesario para extenderlos o adaptarlos a casos o aplicaciones más específicos.

9.2. Corrección de las fluctuaciones temporales en espectrometría FTIR

Retomando de nuevo la descripción del capítulo 4, en un interferómetro de Michelson, para una radiancia incidente monocromática \mathcal{L}_0 con número de ondas ν , se tiene que la radiancia para una diferencia de camino x es:

$$I(x) = \frac{1}{2} \mathcal{L}_0(\nu) \{1 + \cos(2\pi\nu x)\}$$

donde hemos supuesto un *beamsplitter* de comportamiento ideal y transmitancia 1/2 [34]. Para el caso general de luz policromática, habría que integrar la expresión anterior sobre todas las frecuencias. Teniendo en cuenta además la radiancia parásita procedente del interior del instrumento pero modulada en el interferómetro (diafragmas, filtros interferenciales, etc.), $\mathcal{L}_{off}(\nu)$, y la respuesta $R(\nu)$ del detector, la señal medida es:

$$I_m(x) = \frac{1}{2} \int_0^\infty [\mathcal{L}_0(\nu) + \mathcal{L}_{off}(\nu)] R(\nu) \{1 + \cos(2\pi\nu x)\} d\nu + I_{off} \quad (9.1)$$

donde se ha añadido un término I_{off} que recoge los niveles de continua introducidos por el sistema detector, la circuitería de lectura y de acondicionamiento de la señal. Los términos de *offset* pueden ser fácilmente estimados y descontados si se dispone de una medida de referencia, esto es, en ausencia de señal externa, y que en la práctica implica cubrir la totalidad del campo de visión con una fuente de emisión despreciable frente a los términos de radiación interna¹. En el infrarrojo medio o térmico basta una superficie a la temperatura que proporciona un congelador convencional para conseguir situarnos por debajo del límite de detección. El resultado de esta medida de referencia sería:

$$I_r(x) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \mathcal{L}_{off}(\nu) R(\nu) \{1 + \cos(2\pi\nu x)\} d\nu + I_{off}$$

Finalmente el interferograma del que partiremos, sin términos de *offset*, es:

$$I(x) \equiv I_m(x) - I_r(x) = \int_0^\infty \mathcal{L}_0(\nu) \{1 + \cos(2\pi\nu x)\} d\nu \quad (9.2)$$

donde por conveniencia no hemos escrito los factores 1/2 y $R(\nu)$, que en la práctica quedarían englobados en la calibración del sistema.

Consideremos ahora el caso en el que cierta fracción de la radiación entrante presenta una modulación temporal. Asumiremos como hipótesis que esta modulación afecta por igual a todas las frecuencias, de modo que escribimos la radiancia incidente como

$$\mathcal{L}(\nu, t) = \mathcal{L}_0(\nu) \cdot [1 + f(t)]$$

siendo $\mathcal{L}_0(\nu)$ la radiancia promedio y $f(t)$ una *función de modulación* tal que $|f| \leq 1$ y cuyo promedio es $\langle f \rangle = 0$. La variación temporal se traduce en una variación espacial en el dominio del interferograma, ya que para una velocidad v del espejo móvil, $t = x/v$. Escribiendo por comodidad $f(x/v) \equiv f(x)$, tenemos que:

$$\mathcal{L}(\nu, x) = \mathcal{L}_0(\nu) \cdot [1 + f(x)] \quad (9.3)$$

¹Aunque también es posible recurrir a otras estrategias para la estimación del término de *DC* más elaboradas, como la descrita en [99] partir de la eficiencia de modulación del instrumento.

e introduciendo esto en la expresión (9.2) del interferograma,

$$\begin{aligned}
 I(x) &= \int_0^\infty \mathcal{L}_0(\nu) \cdot [1 + f(x)] \cdot \{1 + \cos(2\pi\nu x)\} d\nu = \\
 &= \int_0^\infty \mathcal{L}_0(\nu) d\nu + \int_0^\infty \mathcal{L}_0(\nu) \cos(2\pi\nu x) d\nu + \\
 &+ f(x) \int_0^\infty \mathcal{L}_0(\nu) d\nu + f(x) \int_0^\infty \mathcal{L}_0(\nu) \cos(2\pi\nu x) d\nu \\
 &\equiv I_{dc} + I_{sp}(x) + I_{fl}(x) + I_{ct}(x)
 \end{aligned} \tag{9.4}$$

Cada uno de estos términos es una función de x con un contenido en frecuencias diferente:

- I_{dc} es constante y su valor coincide con el promedio del interferograma: $I_{dc} = \langle I(x) \rangle$.
- $I_{sp}(x)$ tiene justamente las frecuencias de la señal óptica \mathcal{L}_0 (ya que $\cos(2\pi\nu x)$ es una función de x con frecuencia ν). Esta componente de $I(x)$ es el interferograma “clásico” cuya transformada de Fourier nos proporciona el espectro.
- $I_{fl}(x) = f(x)I_{dc}(x)$ contiene sólo las frecuencias de modulación, debidas a las fluctuaciones.
- $I_{ct}(x) = f(x)I_{sp}(x)$ es un término cruzado que contiene tanto las frecuencias ópticas como las de las fluctuaciones.

De ahora en adelante supondremos que el contenido en frecuencias de $f(x)$ no se solapa con las frecuencias presentes en la señal óptica $\mathcal{L}_0(\nu)$, y podemos separar de $I(x)$ los términos $I_{dc}(x)$ e $I_{fl}(x)$. El método más sencillo (aunque otras estrategias son posibles en función de la naturaleza de la fluctuación) es aplicar un operador \mathcal{LP} que implemente un filtro paso-bajo adecuadamente elegido:

$$\mathcal{LP}[I(x)] = I_{dc}(x) + I_{fl}(x)$$

Ahora, como $I_{fl}(x) = f(x)I_{dc}(x)$, podemos estimar la función de modulación haciendo:

$$\hat{f}(x) = \frac{\hat{I}_{fl}(x)}{\hat{I}_{dc}} = \frac{\mathcal{LP}[I(x)]}{\langle I(x) \rangle} - 1 \tag{9.5}$$

Finalmente, podemos estimar la componente del interferograma asociada al espectro como:

$$\hat{I}_{sp}(x) = \frac{I(x) - \mathcal{LP}[I(x)]}{1 + \hat{f}(x)} = \left(\frac{I(x)}{\mathcal{LP}[I(x)]} - 1 \right) \langle I(x) \rangle \tag{9.6}$$

Esta ecuación tiene una sencilla interpretación intuitiva: $\mathcal{LP}[I(x)]$ funciona como una “línea base” y el efecto del cociente $I(x)/\mathcal{LP}[I(x)]$ es referir el interferograma a esa línea base; al restar 1 eliminamos la DC y al multiplicar por $\langle I(x) \rangle$ recuperamos la normalización original.

Hay que subrayar que el interferograma de partida tiene que tener sustraído previamente el *offset*, pues en caso contrario el valor del cociente dependería del valor del *offset*

lo que invalidaría el método de corrección. Este aspecto no es señalado por Keppel-Alleks *et al.* [61], que además utilizan el valor del interferograma filtrado paso bajo evaluado en la posición del ZPD, en vez de $\langle I(x) \rangle$, para renormalizar el interferograma corregido. Esto puede tener el inconveniente de que, como ellos mismos señalan, en ocasiones aparecen artefactos en el ZPD debidos a efectos no lineales en el detector, lo que puede afectar a la correcta calibración de los espectros obtenidos.

La importancia del eliminar el *offset* sí es enfatizada por Ridders *et al.* [99], aunque recurren a su método, basado en la eficiencia de modulación del instrumento, para estimar el término de *offset*, que es mucho más indirecto y menos fiable que el que proponemos aquí, basado en la medida directa de una fuente fría.

9.3. Simulación y análisis de un caso práctico

En la figura 9.1 se muestra una simulación del interferograma correspondiente a la radiación comprendida entre 2500 y 2750 cm^{-1} emitida por un cuerpo negro a la temperatura de 300°C, en el que el 30 % de la señal proveniente sufre fluctuaciones temporales sinusoidales:

$$\mathcal{L}(\nu, x) = \mathcal{L}_0(\nu) \cdot [1 + m \cdot \cos(2\pi\nu_m x)]$$

(siendo $m = 0,3$). La frecuencia espacial equivalente de la fluctuación es $\nu_m = 500 \text{ cm}^{-1}$, lo que podría reproducirse a partir de una frecuencia temporal de 50 Hz y una velocidad de desplazamiento del espejo de $0,1 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$. Se empleará un periodo de muestreo simétrico con respecto a la posición de ZPD correspondiente a $\lambda_{\text{HeNe}} = 632,8 \text{ nm}$, y un número de muestras suficiente como para alcanzar una resolución espectral de $0,5 \text{ cm}^{-1}$.

En la figura 9.1 se comprueba como el efecto de la modulación temporal se traslada directamente al interferograma resultante, apreciándose una notoria distorsión en torno a la posición de ZPD, lo que rompe con la tan característica propiedad de simetría que permite llevar a cabo operaciones como la corrección de fase. Además, se observa una fuerte oscilación en los puntos correspondientes a diferencias de camino óptico mayores, lo que dificulta su correcta interpretación.

Los cuatro términos que constituyen el interferograma son en este caso:

$$I_{dc} = \int_0^{+\infty} \mathcal{L}_0(\nu) d\nu \quad (9.7)$$

$$I_{sp}(x) = \int_0^{+\infty} \mathcal{L}_0(\nu) \cdot \cos(2\pi x \nu) d\nu \quad (9.8)$$

$$I_{fl}(x) = m \cdot \cos(2\pi\nu_m x) \int_0^{+\infty} \mathcal{L}_0(\nu) d\nu \quad (9.9)$$

$$I_{ct}(x) = m \cdot \cos(2\pi\nu_m x) \int_0^{+\infty} \mathcal{L}_0(\nu) \cdot \cos(2\pi x \nu) d\nu \quad (9.10)$$

El impacto de cada uno de los términos se aprecia en la figura 9.2 (donde no se ha representado el término I_{dc} , para una mejor visualización). Se representa I_{fl} en azul, I_{sp} en naranja y el término cruzado I_{ct} en verde.

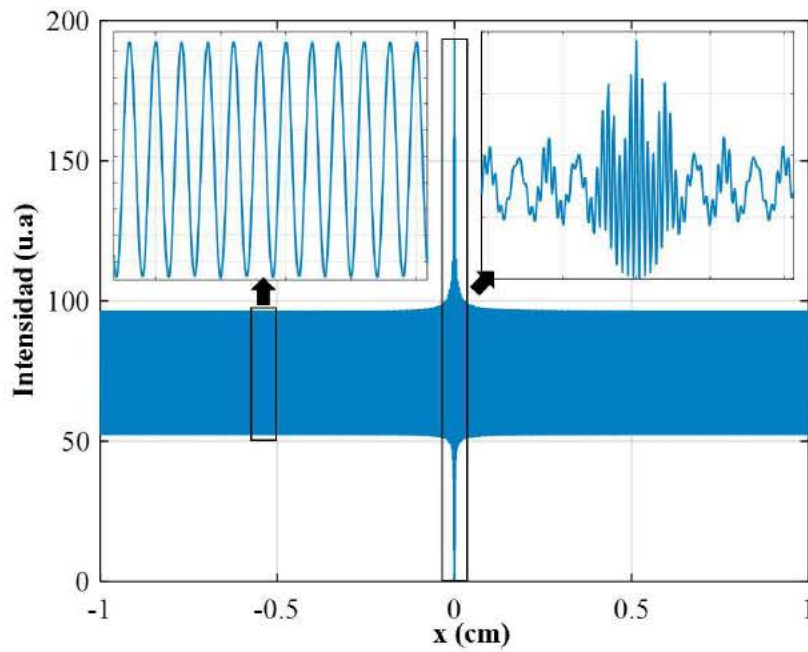


Figura 9.1: Simulación de interferograma completo resultado de introducir una fluctuación temporal sobre la intensidad entrante en el sistema interferométrico.

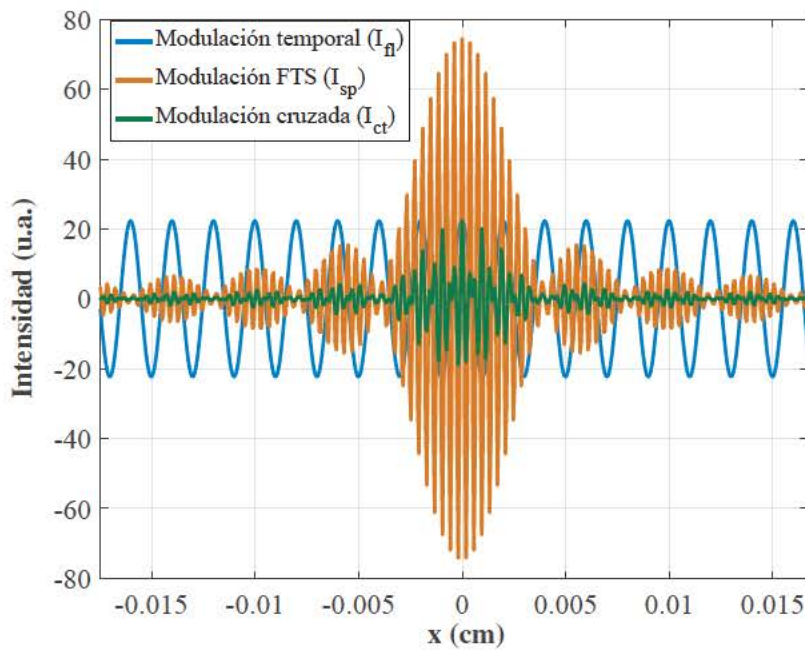


Figura 9.2: Zoom en un entorno próximo a la posición de ZPD sobre las componentes del interferograma denotadas como I_{sp} , I_{fl} y I_{ct} .

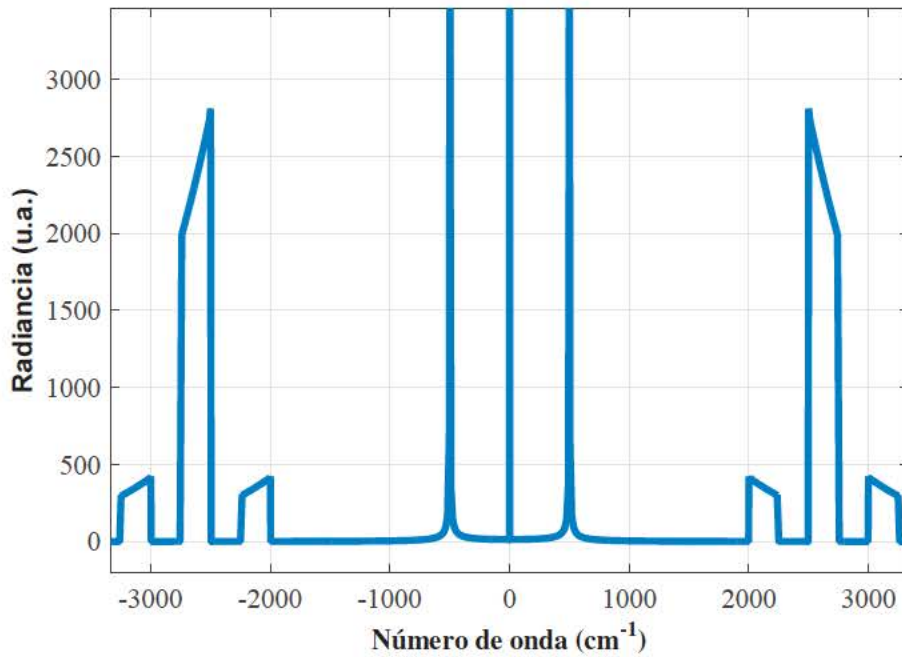


Figura 9.3: Figura correspondiente al espectro modulado por una señal cosenoidal.

Si aplicamos la transformada de Fourier al interferograma mostrado en la figura 9.1 y extraemos la información correspondiente al módulo obtenemos el espectro de la figura 9.3, donde se han representado también las frecuencias negativas.

Se aprecian claramente dos efectos sobre el espectro original que correspondería a una fuente sin fluctuaciones. En primer lugar, hay una fuerte componente espectral similar a una delta de Dirac en la frecuencia correspondiente a la modulación temporal ($\nu_m = 500 \text{ cm}^{-1}$) contenida en el término I_{fl} . Mucho menos energéticas son el resto de componentes, donde se distingue la distribución espectral del cuerpo negro en el intervalo $2500 - 2750 \text{ cm}^{-1}$, correspondiente a la contribución del término I_{sp} , esto es el espectro original. A ambos lados de éste se disponen los artefactos producidos por el término de modulación cruzada I_{ct} , y que consisten en versiones del espectro original atenuadas proporcionalmente a la profundidad de modulación ($m = 30\%$) y trasladadas en ambos sentidos una cantidad equivalente a $\nu_m = 500 \text{ cm}^{-1}$.

Dichos artefactos aparecen debido a que el término cruzado contiene el producto $\cos(2\pi\nu_m x) \cdot \cos(2\pi x \nu)$ que, al hacer la transformada de Fourier, se convierte en la convolución del espectro original con la transformada del coseno, es decir, con $\frac{1}{2}(x(\nu + \nu_m) + x(\nu - \nu_m))$, lo que explica el efecto de traslación mostrado en la figura 9.3. En este ejemplo hemos acotado el ancho de banda del espectro original para que estas “réplicas” no se solapen con este último y se aprecie mejor el efecto, pero lo habitual será que el solapamiento produzca deformaciones muy importantes en el espectro. De hecho, este fenómeno es el responsable de los artefactos que señalábamos en la figura 8.7, donde una cierta potencia radiada era atribuida a regiones carentes de firma espectral como consecuencia del efecto

convolutivo. El término cruzado es pues el que tiene efectos más graves y provoca que para obtener espectros correctos no baste con que ν_m no se superponga a las frecuencias del espectro (lo que se consigue con una adecuada velocidad del espejo móvil), sino que sea imprescindible estimar la componente I_{sp} del interferograma, como hemos explicado.

9.4. Aplicación: medida de combustiones mediante espectroscopia FTIR

Una de las aplicaciones que en los últimos años ha despertado un mayor interés en el ámbito de la espectrometría de imagen es el uso de estos sistemas para la caracterización y análisis de combustiones. Entre los diferentes tipos de dispositivos que se han sometido a análisis, como motores de reacción o sofisticados quemadores [98], es habitual que estos últimos presenten fluctuaciones temporales características, fruto de la fricción existente entre el ascenso de los gases generados en la combustión con la propia atmósfera [74]. Dichas fluctuaciones se conocen en la literatura como *flickering* (parpadeo), debido a que presentan frecuencia bajas (en el entorno de la decena de hercios), lo que las convierte en un fenómeno fácilmente observable a simple vista.

Desde un punto de vista radiométrico, emplearemos un modelo sencillo para describir el comportamiento de la llama. Asumiremos que ésta se conforma a partir de un volumen de gases a alta temperatura compuesto por dos capas: una de ellas interna y en gran medida estable en el tiempo, de espesor constante (l_0), y una segunda capa externa que presenta las fluctuaciones temporales características del fenómeno del *flickering*, esto es, $l_{flick}(t)$: $l = l_0 + l_{flick}(t)$. Suponiendo por simplicidad que, tanto la temperatura de la llama como la concentración de las especies se mantienen constantes a lo largo del camino óptico integrado por cada píxel, y teniendo en cuenta que para un gas $\varepsilon = 1 - \tau_g$, podemos expresar la radiancia detectada como:

$$\mathcal{L}_{det}(x) = \mathcal{L}_{CN}(T_g)(1 - \tau_g(x)) \cdot \tau_{atm} \quad (9.11)$$

donde hemos omitido la dependencia espectral, y $\mathcal{L}_{det}(x)$ representa la radiancia entrante en el interferómetro en cada punto de muestreo x , siendo $\mathcal{L}_{CN}(T_g)$ la radiancia de cuerpo negro a la temperatura de la llama, y τ_{atm} y $\tau_g(x)$ las transmitancias del ambiente y de la llama respectivamente. Este último término es el que introduce la dependencia temporal (y por ende en x) y se expresa en términos de las capas descritas en el modelo radiométrico, tal y como se describe en la ecuación 9.12, en la que la asunción de que la profundidad óptica es baja permite acometer la aproximación lineal. Donde a y c son la absortividad y el valor de la concentración, respectivamente, de cada especie i .

$$\tau_g(x) = e^{-\sum_{i=1}^N a_i c_i \cdot (l_0 + l_{flick}(x))} \approx \sum_{i=1}^N a_i c_i \cdot (l_0 + l_{flick}(x)) \quad (9.12)$$

Caso I. Llamas de alcohol

En primer lugar, aplicaremos el método de corrección propuesto sobre los interferogramas provenientes de una combustión de alcohol. Para ello se ha empleado el espectrómetro de imagen del capítulo 4, compuesto por un interferómetro de Michelson capaz de

alcanzar una resolución espectral de $0,25\text{ cm}^{-1}$ acoplado a un detector de antimonio de indio (InSb), de 320×256 píxeles y con detectividad en el intervalo espectral del infrarrojo medio (de $1,5$ a $5,5\text{ }\mu\text{m}$).

En la realización de las medidas experimentales se ha dispuesto un recipiente con alcohol a una distancia de 1.5 metros del equipo de medida, donde hemos seleccionado una región de interés de 120×80 píxeles para así aumentar la velocidad de desplazamiento del espejo interno y que las fluctuaciones temporales sean traducidas en frecuencias espaciales lo menores posibles. Además, se ha optado por una resolución espectral de $0,5\text{ cm}^{-1}$, más que suficiente para resolver la firma espectral de los principales compuestos, esto es, CO_2 , H_2O y CO , que se espera alcancen temperaturas máximas estimadas del orden de 1000°C .

Hemos seleccionado este caso dado el fuerte impacto que representa la fracción de radiación fluctuante frente a la total, que se traduce en una alta profundidad de modulación y variabilidad, y que nos permite ilustrar los artefactos introducidos por este fenómeno. Esta característica puede comprobarse en la figura 9.4, donde se muestran imágenes de la señal interferométrica para posiciones del espejo en distintos puntos del periodo de la fluctuación. Aquí se observa la evolución espacio-temporal de la radiación emitida que, en un punto central, proporciona interferogramas como el que se muestra en la figura 9.5 (representado en color azul). En esta misma figura (en naranja), se representa el mismo interferograma tras la corrección de fluctuaciones, donde se puede apreciar la eliminación de las componentes de baja frecuencia. Sin embargo, la sola supresión de las componentes de baja frecuencia, de por sí, no supone ninguna mejora en el espectro medido ya que continúan apareciendo réplicas del espectro principal, que son las responsables de la distorsión, y se hace necesario emplear el algoritmo de corrección aquí expuesto.

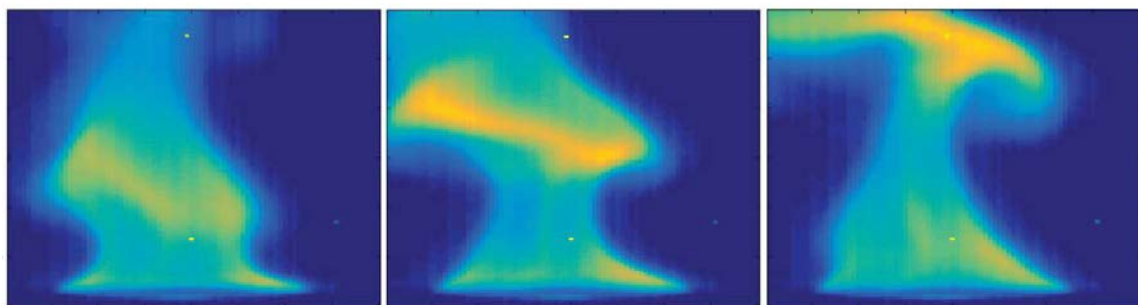


Figura 9.4: Imágenes del interferograma resultante en diferentes posiciones del barrido del espejo móvil para una llama de alcohol, donde se comprueba el efecto denominado como flickering.

El término de modulación cruzada presentado en la sección 9.2 es el responsable de los artefactos que se muestran en el espectro de partida, representado en color azul en la figura 9.6, donde su distribución de radiancia no se corresponde con la firma espectral de los gases generados en la combustión. Si lo comparamos con su versión corregida mediante el método propuesto (en naranja), en la región comprendida entre 2400 cm^{-1} y 2700 cm^{-1} se aprecia un *trasvase* de energía proveniente de la zona de máxima emisión del CO_2 .

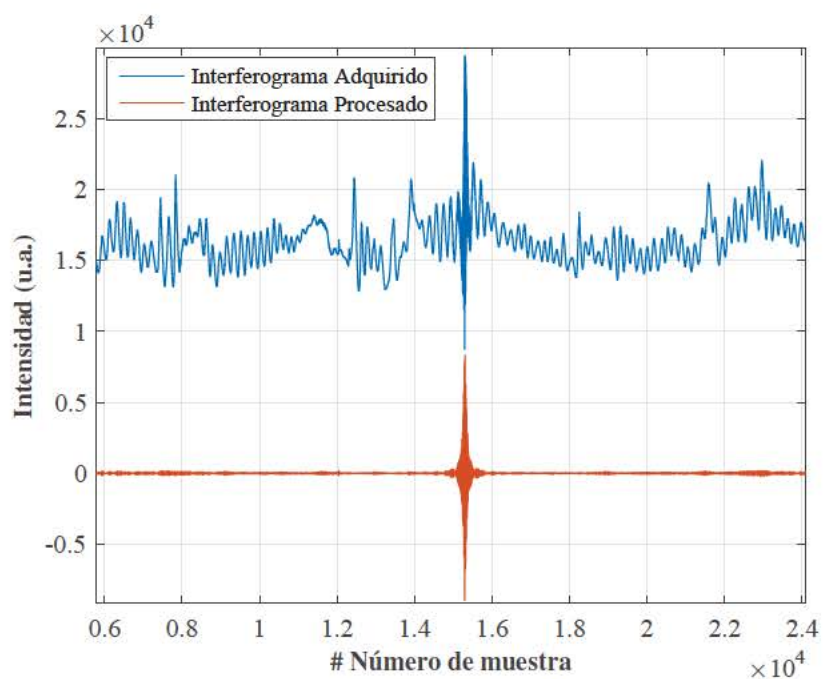


Figura 9.5: Comparación de los interferogramas obtenidos antes (en azul) y después (en naranja) de la aplicación del método de corrección de fluctuaciones propuesto, calculados sobre el píxel (80, 34).

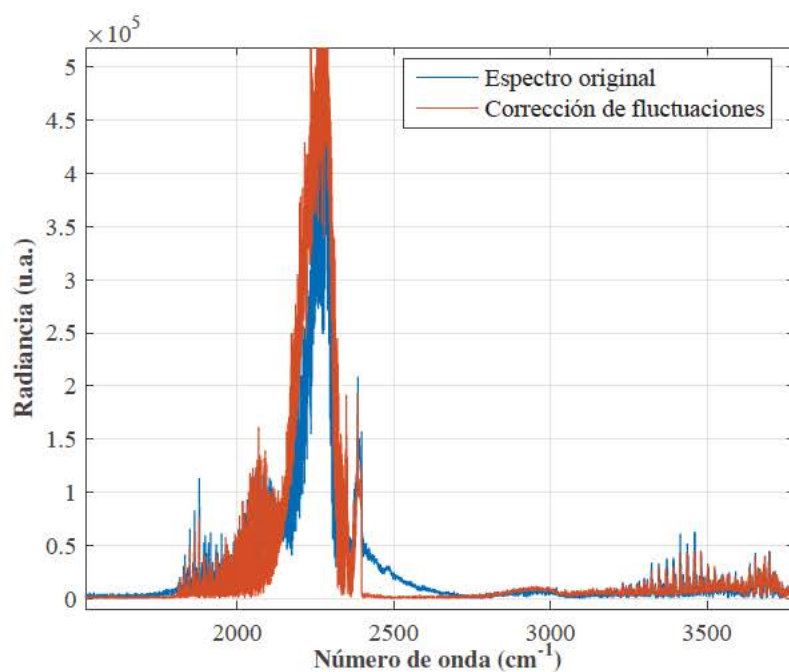


Figura 9.6: Comparación entre los espectros obtenidos previa corrección de fluctuaciones, y tras su aplicación, calculados sobre el píxel (80, 34).

Caso II. Quemador Bunsen

En nuestro segundo caso práctico utilizaremos un quemador de tipo Bunsen como fuente de radiación, igual al empleado en el capítulo anterior y alimentado con una mezcla de butano (C_4H_{10}) y aire común (propiciandó una combustión lo más eficiente posible). El espectrómetro de imagen se sitúa igualmente a una distancia de 1.5 metros, en una configuración similar al esquema de la figura 9.7.

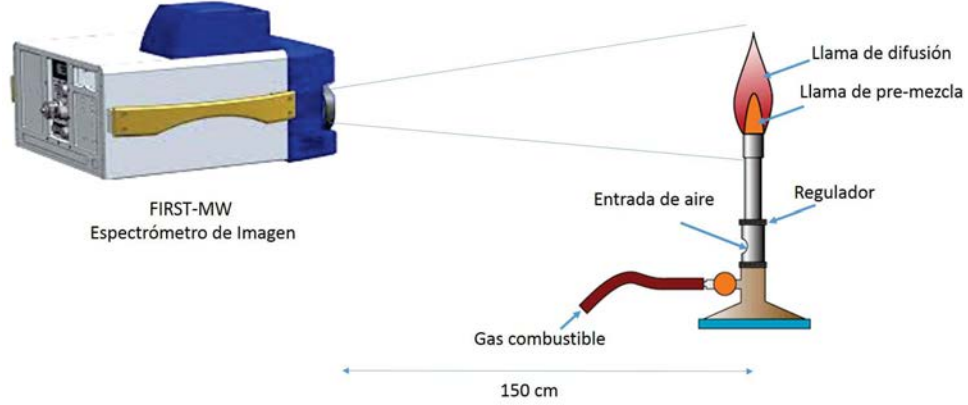


Figura 9.7: Ilustración del esquema de medida en la medida de la radiación emitida por un quemador Bunsen mediante un espectrómetro de imagen.

Los resultados del experimento se muestran en la figura 9.8, donde se representa una imagen de la radiancia en una zona espectral situada entre las bandas de emisión del monóxido y el dióxido de carbono ($\nu = 2175 \text{ cm}^{-1}$), que permite apreciar la distribución espacial de la llama de combustión generada.

Podemos comprobar tanto el efecto de las fluctuaciones temporales como el de la baja estabilidad que presenta la combustión sin más que atender a los interferogramas obtenidos. En la figura 9.9 se muestra un interferograma correspondiente a la región central de la llama, donde se aprecia la fuerte presencia de *flickering*, junto al interferograma resultante tras aplicar el procedimiento de corrección de fluctuaciones aquí descrito. Tal y como se observa en la figura, hemos optado por seleccionar el valor medio del interferograma incidente como el nivel de referencia sobre el cual estimar la función de modulación ($f(x)$). Por su parte $\mathcal{LP}[I(x)]$ se ha obtenido previo filtrado del interferograma original mediante un filtro FIR paso bajo de tipo Butterworth, con 8 coeficientes y frecuencia de corte $\nu_{cut} = 1800 \text{ cm}^{-1}$, eliminándose en una etapa posterior la fase introducida por dicho filtro.

Sin embargo, también cabría la posibilidad de eliminar toda contribución del *flickering* de la medida, sin necesidad de incluir su valor efectivo (o *rms*). Para ello podríamos considerar que el espectro instantáneo en cada uno de los puntos del interferograma se modela de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\nu, x) &= \mathcal{L}_0(\nu)(1 + m \cdot \cos(2\pi\nu_m x)) \\ &= \mathcal{L}_0(\nu)(1 - m) + 2 \cdot \mathcal{L}_0(\nu) \cdot m \cdot \cos^2(\pi\nu_m x)\end{aligned}\quad (9.13)$$

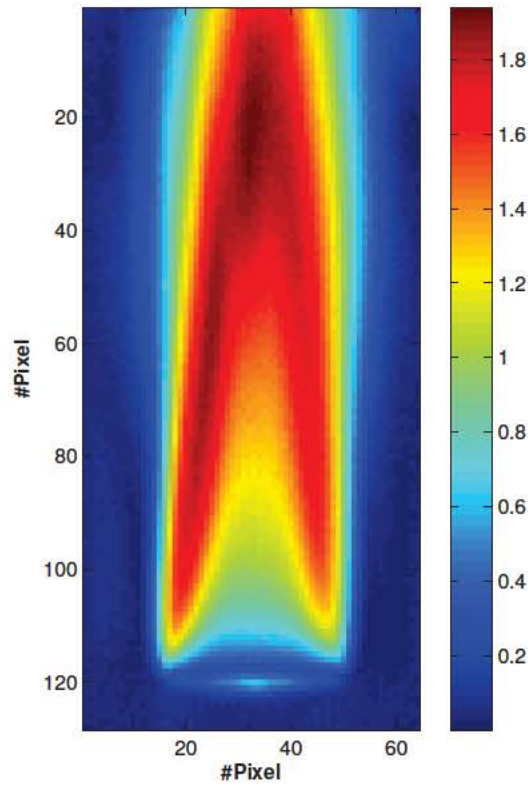


Figura 9.8: Imagen de radiancia espectral en $\nu = 2175 \text{ cm}^{-1}$ para la medida experimental sobre una llama proveniente de un quemador tipo Bunsen.

El término $\mathcal{L}_0(\bar{\nu})(1-m)$ se correspondería con el espectro proveniente de la capa interna de la llama, sin contribución de la interfaz de gases contigua. De forma que es posible adaptar la función de corrección $\hat{f}(x)$ para conseguir la eliminación completa de las fluctuaciones, dado que el criterio de proporcionalidad espectral sigue satisfaciéndose. En el caso que nos ocupa implicaría emplear la función de estimación indicada en la expresión 9.14, donde el término $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L}_0(\nu) \cdot (1-m) d\nu$ puede estimarse a partir del interferograma $\mathcal{LP}[I(x)]$ mediante la creación de una línea base artificial conformada mediante la interpolación de los mínimos locales debidos a las variaciones temporales. En la figura 9.9 se muestra un ejemplo de obtención de dicha línea base, representada en color verde y trazo grueso.

$$\hat{f}(x) = \frac{\mathcal{LP}[I(x)]}{\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L}_0(\nu) \cdot (1-m) d\nu} - 1 \quad (9.14)$$

Una vez llevada a cabo la corrección de fluctuaciones (en este caso, tomando sólo como referencia el valor promedio del interferograma, para lograr una representación más

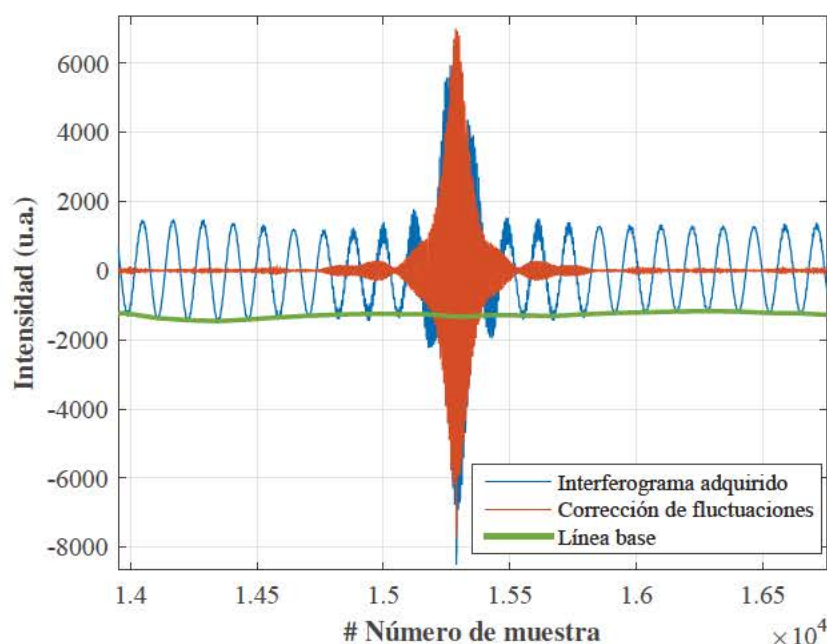


Figura 9.9: Ejemplo de interferograma experimental correspondiente al píxel (80, 34) de la imagen de radiancia espectral, antes y después de llevar a cabo la corrección de fluctuaciones.

clara), podemos comprobar los efectos que ésta tiene sobre los espectros recuperados atendiendo a la figura 9.10. En azul se muestra el espectro correspondiente al interferograma sin procesar, mientras que en color naranja se ha representado el espectro del interferograma corregido. Se puede apreciar como el espectro de partida presenta artefactos en regiones en las que los gases presentes carecen de firma espectral, como es el caso de la región comprendida entre 2400 cm^{-1} y 2500 cm^{-1} , debidos al efecto del término cruzado I_{ct} sobre el espectro. También se comprueba como la región espectral situada entre 2050 cm^{-1} y 2200 cm^{-1} (correspondiente a las líneas de emisión del CO) sufre alteraciones en su línea base, lo que puede provocar serios inconvenientes al aplicar técnicas de procesado basadas en ajustes con modelos simulados para la estimación de magnitudes como la temperatura y/o la concentración de compuestos.

9.5. Hipótesis y consideraciones

En esta última sección recapitularemos las hipótesis consideradas en este capítulo y expondremos alguno de los factores más relevantes que afectan al procedimiento propuesto:

- En primer lugar, es necesario mencionar que existen instrumentos en los que no es posible disponer de la componente continua del interferograma, ya que éste es filtrado como parte de las etapas de pre-procesado implementadas de “fábrica”. En esos instrumentos la metodología propuesta no podría llevarse a cabo.

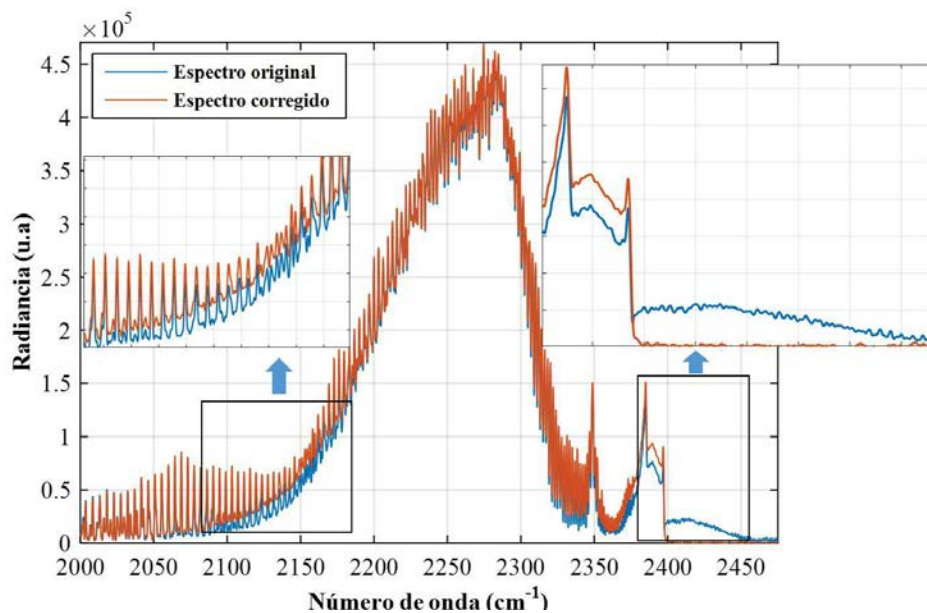


Figura 9.10: Comparación entre los espectros obtenidos previa corrección de fluctuaciones, y tras su aplicación, calculados sobre el píxel (80, 34).

- Aunque se menciona a lo largo del desarrollo teórico, es conveniente remarcar que se ha supuesto que la perturbación temporal no tiene dependencia espectral, es decir, que afecta por igual a todas las frecuencias del espectro de la luz incidente. Esta hipótesis es lo que permite extraer la función $f(x)$ de las integrales y hace posible descontar su efecto en las ecuaciones 9.5 y 9.6. Esta situación es la que se daría si, por ejemplo, tenemos un cuerpo negro cuya radiación es modulada por un *chopper* o una llama caliente en la que el espesor óptico fluctúa, como hemos tratado. Sin embargo, no se daría este caso si lo que se modulara fuera la temperatura del cuerpo negro o la llama, porque entonces la composición espectral de la luz variaría con las fluctuaciones. Nuestra solución provocaría entonces errores cuya magnitud habría que estimar en cada caso, aunque frecuentemente no serían muy grandes [61].
- Es necesario aclarar que la distribución de frecuencias espaciales (ν) de la función de modulación ($f(x)$) no debe solaparse con el espectro medido, dado que el método se basa en estimar la componente aditiva de la señal perturbación mediante el análisis en frecuencia, y generalmente mediante un filtrado paso bajo. En el caso de que la fluctuación presentara una única componente frecuencial, como en el ejemplo teórico analizado, es sencillo obtener una relación entre dicha frecuencia y el ancho de banda del espectro de partida para estimar el grado de solapamiento ocasionado por la perturbación. En la práctica, mientras las fluctuaciones temporales tengan un ancho de banda acotado, será posible actuar sobre el interferómetro para minimizar el impacto sobre el espectro medido [114]. Un ejemplo sencillo de esto último podemos encontrarlo si variamos la velocidad del espejo, alterando la relación de transformación entre el dominio temporal y el espacial.

- En general, supondremos que el ancho de banda de la función de modulación es finito e inferior a la frecuencia de corte del detector ν_c . Este último requisito en realidad siempre puede conseguirse con tal de que se cumpla el anterior, haciendo suficientemente rápido el desplazamiento del espejo móvil.

Finalmente, sólo recordaremos que en determinadas situaciones el fenómeno aquí tratado podría compensarse mediante el simple promedio de interferogramas, o bien de espectros reales (previa corrección de fase para no sumar valores absolutos). Esta solución ha sido implementada por otros autores [98], pero tiene el inconveniente de exigir medidas durante periodos muy largos, lo que en algunos casos puede ser imposible, y de ser muy poco eficiente en términos de la cantidad de datos necesaria (parámetro nada desdeñable al trabajar con sistemas de imagen). Una ventaja adicional del método aquí expuesto es que, al requerir tiempos de adquisición mucho menores, la variabilidad de las medidas también se verá reducida.

Recuperación de la temperatura en llamas: resultados experimentales

Una vez disponemos de un método que permite corregir las inestabilidades temporales en los interferogramas, y tras el paréntesis realizado en el capítulo anterior, podemos retomar nuestro trabajo experimental y aplicar la metodología descrita en el capítulo 8 a una campaña de medidas representativa de los objetivos que se persiguen en el proyecto de investigación EMPRESS. Puesto que no se dispone de la llama estándar desarrollada en el proyecto, las medidas se harán sobre un quemador de tipo Bunsen, alimentado por butano, que se prevé alcance temperaturas superiores a los 1500°C , y que no se encontraría tan alejado de los 2350 K de la llama patrón. La campaña de medidas se ha llevado a cabo en las instalaciones del Centro Español de Metrología, y, en concreto, en el Área de Termometría de Radiación, dado que se ha hecho uso de sus patrones de calibración radiométrica para caracterizar nuestro sistema de forma precisa.

El objetivo de este capítulo es describir las medidas experimentales y analizar los resultados obtenidos: las distribuciones de temperatura y densidad de columna recuperadas para cada píxel. La primera de las tareas que realizaremos es la adaptación del equipo de medida, el espectrómetro de imagen FIRST-MW, a la medida de un fenómeno tan energético como es una combustión. Hecho esto, pasaremos a describir las medidas realizadas, donde tienen aplicación bien de forma directa o indirecta buena parte de los resultados obtenidos en el transcurso de este trabajo.

10.1. Adaptación del equipo de medida

En el capítulo 8 comprobamos como la radiancia total proporcionada por una combustión en el infrarrojo medio equivalía a la de un cuerpo negro con temperatura inferior a los 600°C . Utilizando este resultado a modo de cota superior, es conveniente que la radiación entrante en el interferómetro sea atenuada de forma conveniente, ya que el tiempo de integración mínimo seleccionable no alcanza a cubrir dicho rango y produce la saturación del detector infrarrojo. Para evitar esto, la opción más simple consiste en colocar un diafragma a la entrada del interferómetro, reduciéndose la energía entrante en el sistema, ya que el número F (sección 2.4.2) aumenta. Para seleccionar el diámetro es necesario contemplar que la radiación emitida por el propio diafragma reduce el rango dinámico disponible para la radiación externa en la etapa de conversión AD, al tiempo que aumen-

ta la influencia de condiciones de medida tales como la temperatura ambiente. Al intentar lograr una relación de compromiso razonable entre los efectos mencionados, en nuestro caso hemos optado por una diámetro de apertura $D = 15,3 \text{ mm}$.

Al margen de las consideraciones de tipo energético, otro de los factores a tener en cuenta es el geométrico, en lo que respecta a la resolución espacial que podremos alcanzar. En nuestro caso, el factor limitante viene impuesto por la distancia mínima de enfoque del sistema óptico, igual a 2 metros. Una de las alternativas es emplear una lente correctora (con una distancia focal de 6.5 metros) inicialmente diseñada para eliminar los reflejos múltiples producidos en el interior del *beamsplitter* [45, 34], desviándolos hasta que queden fuera del array de detectores. Además de reducir la influencia de dichos haces denominados *ghosts*, la lente correctora permite reducir la distancia mínima de enfoque de 2 a 1.5 metros, lo que supone un aumento del 33 %. Los efectos de anteponer la lente correctora delante del interferómetro se han representado en la figura 10.1, a partir de un esquema de propagación de los rayos entrantes facilitado por el fabricante.

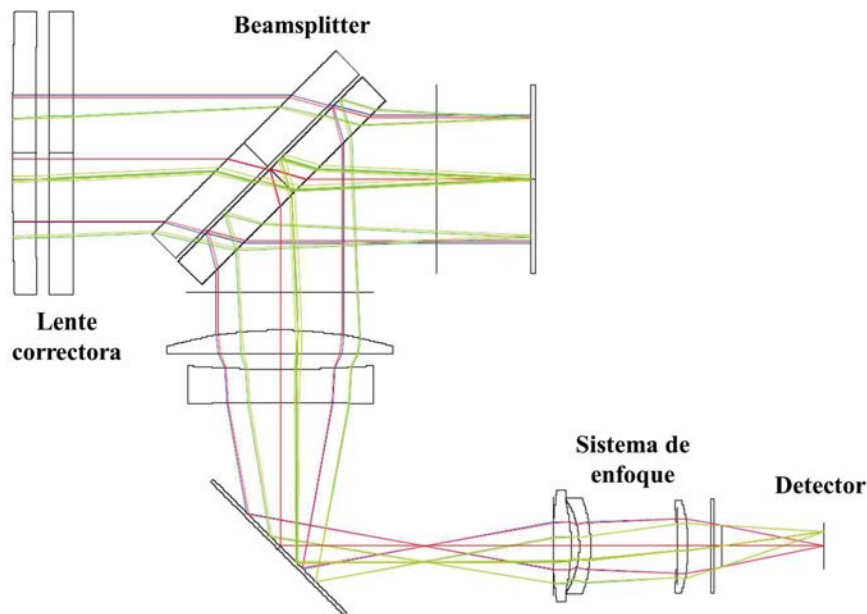


Figura 10.1: Ilustración de la propagación de los rayos en el interior del interferómetro tras introducir una lente correctora. Diagrama facilitado por el fabricante del sistema, Telops Inc.

10.2. Descripción de la campaña de medidas

La campaña de medidas fue realizada en las instalaciones del Centro Español de Metrología, en el Laboratorio de Termometría de Radiación dentro del Área de Temperatura. Dicho laboratorio dispone de patrones de calibración basados en cuerpos negros de alta emisividad, temperatura y precisión, además de instrumentación de medida de altas prestaciones.

Se llevarán a cabo, por un lado, las medidas de calibración radiométrica de nuestro

sistema espectrorradiómetro de imagen mediante el procedimiento descrito en el capítulo 8, y, por otro, la realización de medidas sobre la combustión de una llama preliminar, que en este caso es un mechero Bunsen alimentado con butano comercial.

En lo que respecta a la calibración, se emplearon dos temperaturas de referencia, 180°C y 400°C , adquiridas con una resolución espectral de $0,5\text{ cm}^{-1}$, aunque en el cálculo de G y offset su uso se restringe a 4 cm^{-1} , y un total de 4 *scans*. El tiempo de integración seleccionado fue de $20\text{ }\mu\text{s}$, y cada punto de calibración va acompañado por una medida para la estimación de la radiación interna (*offset*) del equipo, para así corregir las posibles derivas temporales, también sujetas a factores externos como la temperatura ambiente de la sala. Este *offset* coincidiría con el obtenido en la calibración y puede estimarse sin más que cubrir el campo de visión del equipo mediante una superficie cuya radiación sea inferior al límite de detección. En este caso concreto, dicha condición es fácil de conseguir sin más que recurrir a una placa fría (como la que proporcionaría un congelador convencional, tal y como proponíamos en el capítulo anterior), puesto que la sensibilidad del sistema prevé niveles de radiación mucho mayores. En la figura 10.2 se muestra una fotografía tomada durante el proceso de calibración, donde se distingue el sistema de imagen hiperespectral frente a diferentes cuerpos negros de alta temperatura.

Por otro lado, las medidas sobre el quemador de butano fueron adquiridas bajo la misma configuración del sistema que empleamos en la calibración, en cuanto al uso de diafragma, resolución espectral y tiempo de integración. En la figura 10.3 se muestra una fotografía tomada durante el proceso de medida.



Figura 10.2: Proceso de calibración del sistema de imagen hiperespectral FIRST-MW, en las instalaciones del Centro Español de Metrología (CEM), dentro del Laboratorio de Termometría de Radiación.



Figura 10.3: Medida realizada en CEM sobre un quemador de tipo Bunsen, en este caso, utilizando un cuerpo negro estabilizado como fondo.

10.3. Recuperación de mapas de temperatura y cantidad de gas

Una vez finalizada la campaña de medidas, los cubos de datos adquiridos fueron procesados siguiendo las etapas descritas en el diagrama del capítulo 8, que incluye la corrección de fluctuaciones temporales, las técnicas de procesamiento espectral del capítulo 4 y la reducción de ruido basada en componentes principales del capítulo 6, hasta la obtención de la radiancia tras el proceso de calibración. Sobre ésta se aplica el algoritmo de ajuste iterativo en cada píxel, actuando sobre 4 variables del modelo radiométrico: la densidad de columna del CO_2 (el componente mayoritario), la densidad de columna del CO , la temperatura de la combustión (supuesta igual para ambos compuestos) y la densidad de columna del CO_2 ambiente. En este caso se estima la temperatura de forma simultánea para ambos compuestos (CO_2 y CO), lo que implica usar un ancho espectral mayor que en los casos anteriores, al tiempo que se consigue una mayor robustez en las estimaciones alcanzadas. Durante el proceso de medida, la cantidad de CO_2 ambiente puede sufrir importantes modificaciones, dado que este compuesto es generado por la propia combustión en una cantidad apreciable, con una concentración del orden del 10 %. Por este motivo se ha incluido como parte de las variables recuperadas por el algoritmo, y dado que su temperatura es muy inferior a la del CO_2 contenido en la combustión, será posible distinguir la contribución de ambas fuentes. Finalmente, la región espectral de ajuste abarca desde 2000 cm^{-1} hasta 2300 cm^{-1} .

Los resultados obtenidos se muestran en la figura 10.4, mediante las imágenes de temperatura y densidad de columna para cada uno de los compuestos. Los valores de temperatura máximos alcanzados se sitúan en torno a los 1950 K en la región correspondiente a la llama de difusión, lo que concuerda con los valores esperados en este tipo de quemadores. La distribución de las densidades de columna de CO_2 y CO nos da una idea de la eficiencia de la combustión en las distintas regiones de la llama. Un nivel de CO_2 alto es indicativo de una buena combustión, esto es, que consta de oxígeno suficiente como para reaccionar con todo el combustible inyectado en la mezcla. Y, al contrario, el monóxido de carbono pasa a producirse cuando la eficiencia de la combustión es baja, y ese es el motivo por el que ambos compuestos predominan en regiones diferentes de la llama.

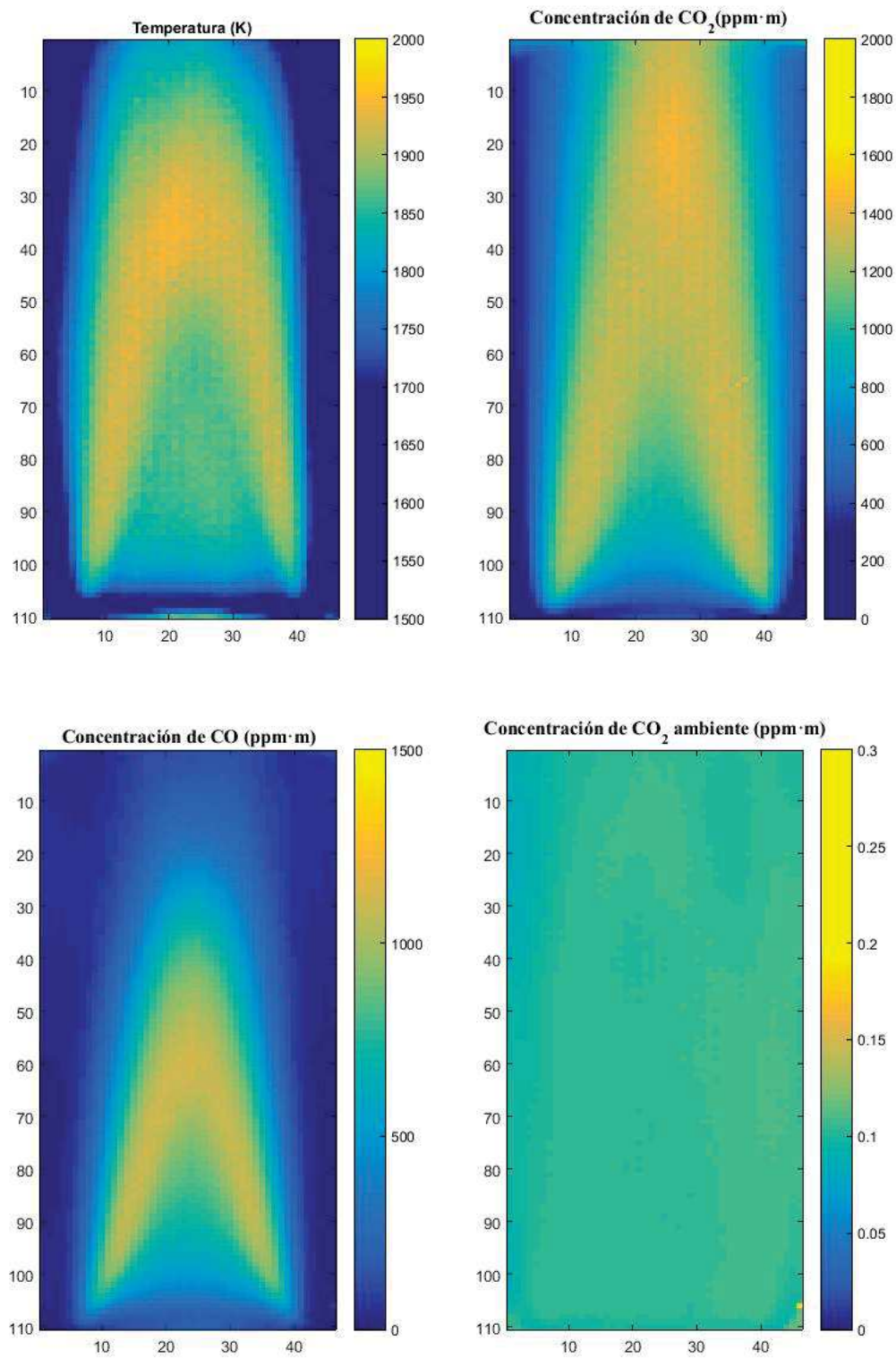


Figura 10.4: Imágenes con los valores recuperados de temperatura y densidad de columna para dióxido y monóxido de carbono, así como una estimación del CO₂ ambiente.

En cuanto a la cantidad de CO_2 ambiente, esta permanece prácticamente constante a lo largo de todos los píxeles independientemente de la concentración de CO_2 fruto de la combustión, tal y como habríamos de esperar. Lo cual indica que nuestro algoritmo es capaz de discernir entre ambas fuentes de CO_2 a partir de una única medida, y sólo atendiendo a la diferencia térmica que dista entre ambas.

A modo de ejemplo del buen grado de ajuste que se ha obtenido con las simulaciones radiométricas, en la figura 10.5 se muestra una gráfica comparativa entre un espectro experimental, correspondiente a un píxel del centro de la combustión, junto al espectro teórico alcanzado por el algoritmo de ajuste iterativo. Puede apreciarse como las diferencias entre ambos son muy pequeñas incluso lejos de la región de ajuste, lo que indica que los errores asociados a discrepancias entre el modelo teórico y el experimental son también muy reducidos.

10.4. Análisis de incertidumbre

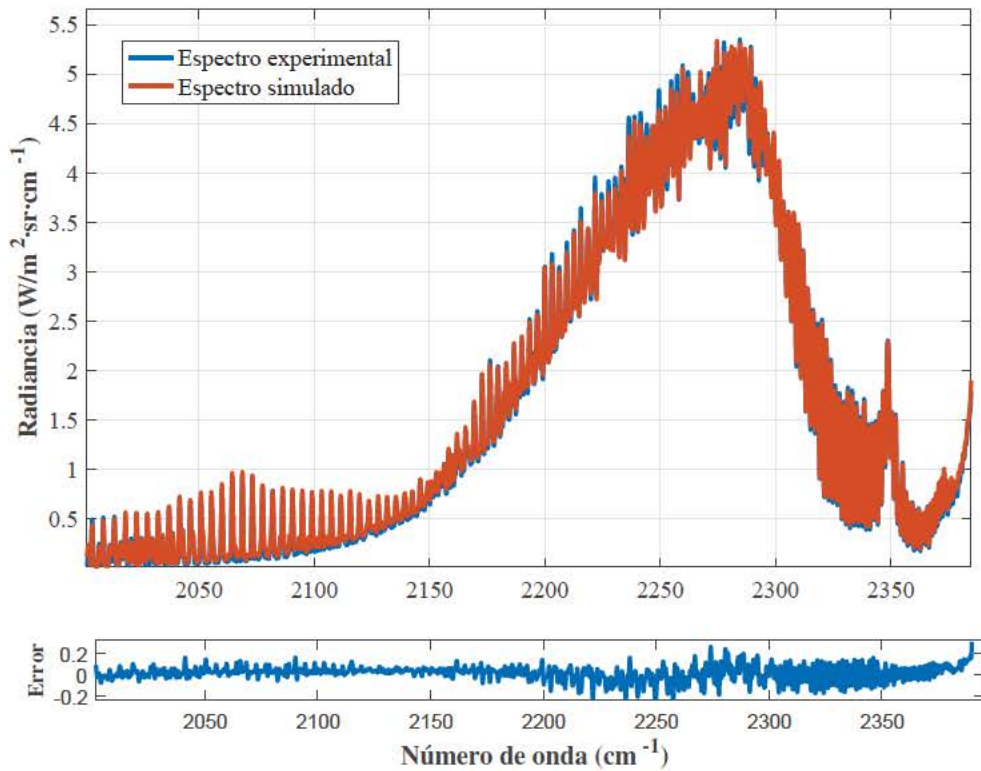
Dado que uno de los objetivos del proyecto EMPRESS consiste en reducir los altos niveles de incertidumbre en la medida de la temperatura, durante esta sección trataremos de caracterizar esta magnitud para nuestro procedimiento de medida. Para alcanzar dicha estimación, el análisis de incertidumbre se ha dividido en dos etapas. En primer lugar, comenzaremos con el cálculo de la incertidumbre asociada a las medidas experimentales en términos de radiancia, esto es, tras la calibración radiométrica; lo cual incluye la propagación analítica de las principales fuentes de incertidumbre como son el ruido del sistema de medida y las incertidumbres en la emisividad y temperatura de los cuerpos negros de referencia. Tras esto, la incertidumbre en la radiancia tiene que trasladarse a las magnitudes recuperadas por el algoritmo de ajuste iterativo, sin que para este proceso dispongamos de una expresión analítica cerrada. Esta segunda etapa de propagación de incertidumbre la llevaremos a cabo mediante el método de Monte Carlo, simulando un número elevado de espectros ruidosos representativos de la medida experimental.

Incetidumbre en la radiancia

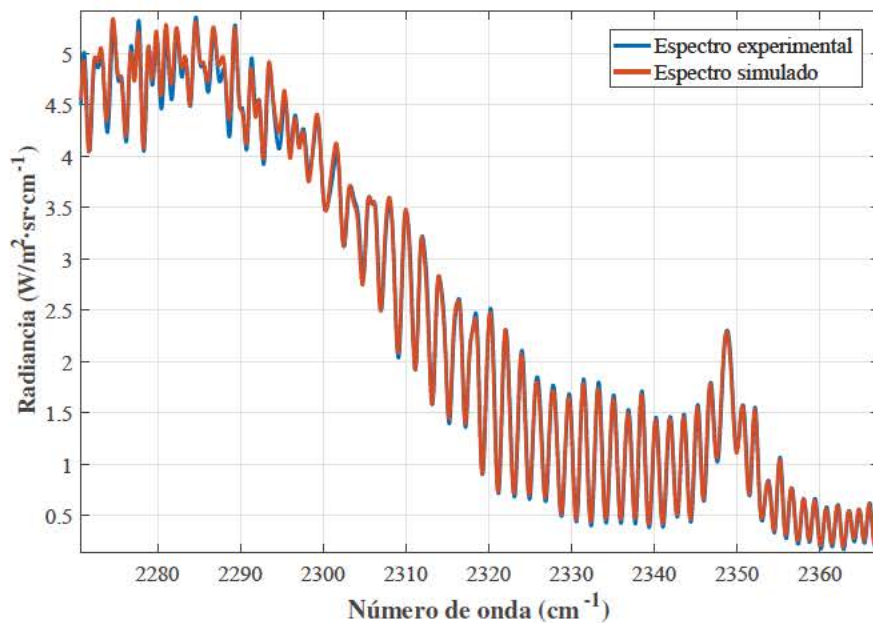
Como norma general, cada cubo de datos medido es adquirido junto a una medida para la estimación del término de *offset*, cuya contribución mayoritaria es la radiación interna del interferómetro. De esta forma, la función de calibración para convertir los niveles digitales en unidades de radiancia espectral ($W/m^2 \cdot sr$), y que exponíamos en la sección 4.4.1, puede simplificarse en la estimación de un sólo término, el correspondiente a la ganancia espectral $G(\nu)$. Con esta simplificación, la radiancia experimental con la componente de *offset* ya sustraída se calcularía a partir del espectro medido $S_m(\nu)$ como sigue:

$$\mathcal{L}_{cal}(\nu) = \frac{\mathcal{L}_{T_2}(\nu) - \mathcal{L}_{T_1}(\nu)}{S_{T_2}(\nu) - S_{T_1}(\nu)} S_m(\nu) = \frac{\varepsilon_{T_2}(\nu) \mathcal{L}_{CN}(\nu, T_2) - \varepsilon_{T_1}(\nu) \mathcal{L}_{CN}(\nu, T_1)}{S_{T_2}(\nu) - S_{T_1}(\nu)} S_m(\nu) \quad (10.1)$$

A partir de esta expresión podemos identificar las principales fuentes de incertidumbre, que clasificaremos en función del grado de correlación espectral:



(a) Comparativa entre el espectro experimental (en azul) y el simulado (en naranja) a partir de los valores óptimos obtenidos para Q_{CO_2} , Q_{CO} , $Q_{\text{CO}_2, \text{amb}}$ y T .



(b) Detalle de la región correspondiente al CO_2 , donde se muestra la estructura fina de su firma espectral.

Figura 10.5: Ejemplo de ajuste para un píxel representativo del interior de la zona de combustión.

- Por un lado se encontrarían las incertidumbres asociadas a la variaciones de la emisividad y temperatura de las referencias empleadas en la calibración: ε_{T_1} , ε_{T_2} , T_1 y T_2 . Puesto que una alteración en cualquiera de estos parámetros afectaría por igual a todas las longitudes de onda, este comportamiento puede modelarse a través de una alta correlación espectral, para lo que definiremos un término de varianza espectralmente correlada σ_c^2 que de cuenta de la incertidumbre correspondiente a estas magnitudes:

$$\sigma_c^2 = \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{cal}}{\partial \varepsilon_{T_1}} \sigma_{\varepsilon_{T_1}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{cal}}{\partial \varepsilon_{T_2}} \sigma_{\varepsilon_{T_2}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{cal}}{\partial T_1} \sigma_{T_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{cal}}{\partial T_2} \sigma_{T_2} \right)^2 \quad (10.2)$$

- Por otra parte, se encontrarían las fuentes de error asociadas a los términos obtenidos de forma experimental: S_{T_1} , S_{T_2} y S_m . En este caso, el ruido es el proveniente del proceso de medida, introducido fundamentalmente por el detector infrarrojo y la etapa de digitalización, por lo que podemos considerarlo de naturaleza fundamentalmente térmica. Por tanto, aproximaremos su distribución espectral por un valor constante (ruido blanco) y no contemplaremos ningún tipo de correlación entre distintas longitudes de onda. De forma equivalente al caso anterior, hemos definido la varianza sin correlación espectral σ_{dc}^2 como:

$$\sigma_{dc}^2 = \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{cal}}{\partial S_{T_1}} \sigma_{S_{T_1}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{cal}}{\partial S_{T_2}} \sigma_{S_{T_2}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{cal}}{\partial S_m} \sigma_{S_m} \right)^2 \quad (10.3)$$

La incertidumbre total que se propagaría a la medida experimental, una vez calibrada en unidades de radiancia, vendría dada por la desviación estándar correspondiente a la suma de ambas contribuciones, $\sigma_{tot} = \sqrt{\sigma_c^2 + \sigma_{dc}^2}$.

Estimación de la incertidumbre en la medida

Una vez hemos diferenciado las distintas fuentes de incertidumbre y cómo éstas se propagarían en el proceso de calibración, sólo faltan por estimar los valores de cada una de las magnitudes mencionadas. En lo referente a los parámetros de calibración, el Centro Español de Metrología nos ha proporcionado los datos correspondientes a la incertidumbre y el valor nominal de la temperatura y emisividad asociada a los cuerpos negros empleados en las medidas de calibración, y que se resumen en la tabla 10.1.

Por otro lado, el ruido experimental se considera que sigue una distribución normal de media cero y varianza correspondiente al ruido térmico. Además, en este tipo de sistemas es habitual referirse a la figura de mérito conocida como NESR (*Noise Equivalent Spectral Radiance*), que define la radiancia espectral necesaria para producir una relación señal a ruido unitaria. En [22] se describe la expresión 10.4, empleada para la determinación teórica de dicho parámetro; donde τ es la transmitancia del sensor, EM es la eficiencia de modulación (la relación entre la componente alterna y el nivel de continua), Θ es el

Variable	Valor nominal	Incertidumbre (σ)
T_1	$180^\circ C$	$0,4^\circ C$
T_2	$400^\circ C$	$0,4^\circ C$
ε_{T_1}	0,9841	0,02
ε_{T_2}	0,9841	0,02

Tabla 10.1: *Parámetros de calibración correspondientes a las medidas realizadas en las instalaciones del Centro Español de Metrología.*

$throughput^1$ correspondiente a un único píxel, $\Delta\nu$ es el espaciado espectral, y t es el tiempo de integración de la medida.

$$NESR = \frac{NEP}{0,5 \cdot \tau \cdot EM \cdot \Theta \cdot \Delta\nu \cdot t^{1/2}} \quad (10.4)$$

Dado que el fabricante nos proporciona una estimación de la NESR junto a los parámetros de configuración empleados ($\Delta\nu$, t y $throughput$, debido al uso del diafragma), una alternativa para caracterizar el nivel de ruido consiste en utilizar la ecuación anterior (10.4) para predecir el valor de NESR para la configuración empleada en nuestras medidas, asumiendo que el resto de parámetros no sufre variación. La NESR medida por el fabricante presenta una distribución espectral aproximadamente plana en la banda de operación del sistema, cuyo valor promedio es de $5 \text{ nW/cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}$, para un tiempo de integración de $300 \mu\text{s}$ y un espaciado de $\Delta\nu = 16 \text{ cm}^{-1}$.

Si consideramos que la lente correctora ejerce un efecto despreciable en el ángulo sólido sostenido por cada píxel, la reducción de Θ debida al diafragma puede calcularse sin más que conocer la pupila de entrada original y el diámetro del diafragma empleado. La relación entre el $throughput$ obtenido con y sin diafragma resultaría en:

$$\frac{\Theta_{diaf}}{\Theta} = \frac{\Omega_{diaf} \cdot A_d}{\Omega \cdot A_d} \approx 3,5 \quad (10.5)$$

donde Ω_{diaf} y Ω representan el ángulo sólido de la radiación entrante a cada píxel con y sin diafragma, respectivamente, y A_d es el área del detector, que en este caso permanece constante. Particularizando al resto de parámetros de nuestra configuración, $t = 20 \mu\text{s}$ y $\Delta\nu = 0,5 \text{ cm}^{-1}$, el valor de NESR obtenido es de aproximadamente $175 \text{ nW/m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}$.

Una vez caracterizadas todas las fuentes de incertidumbre, calcularemos la varianza espectral tomando como referencia un espectro de medida calibrado correspondiente a un píxel representativo de la combustión, y haciendo uso de las expresiones 10.2 y 10.3. Haciendo el cálculo se comprueba como la incertidumbre asociada a los factores experimentales de la medida (σ_{dc}) es prácticamente despreciable frente a las variaciones de

¹En este caso representa el producto entre el tamaño del píxel y el ángulo sólido que sustenta, medido en $\text{m}^2 \cdot \text{sr}$. Nos ofrece una medida conjunta de la capacidad del sistema para recolectar radiación externa y de amplificar la irradiancia incidente en el detector, detalles adicionales acerca de este parámetro pueden consultarse en [34] y [8].

emisividad y temperatura en las medidas de referencia (σ_c). En concreto, se obtienen para σ_{dc} valores de incertidumbre del orden de $100 \text{ nW/m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}$ frente a aquellos en el rango de $1 \text{ mW/m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}$ que se alcanzan en σ_c . Este resultado se muestra en la figura 10.6, donde es conveniente señalar que la distribución espectral está determinada en gran medida por la forma del término de medida $S_m(\nu)$, que en este caso es muy selectivo y dista mucho de la distribución característica de un cuerpo negro.

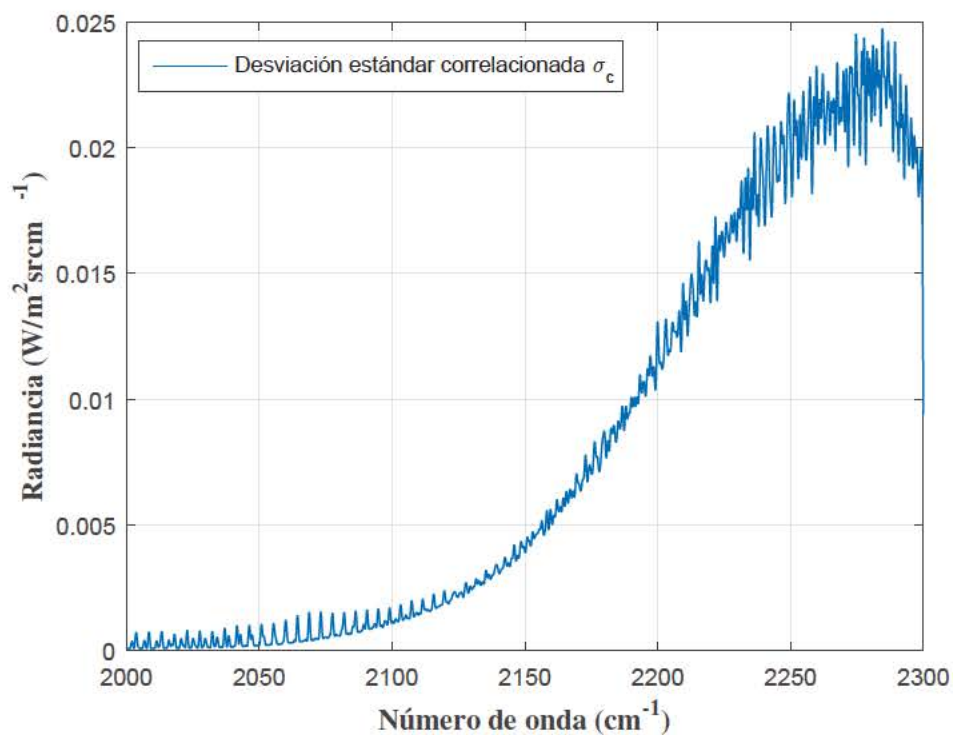


Figura 10.6: Distribución espectral de la desviación estándar correspondiente a las incertidumbres asociadas con la emisividad y temperatura de los cuerpos negros empleados en la calibración, esto es, σ_c , para un píxel representativo y para el ancho de banda empleado en el ajuste iterativo.

Método de Monte Carlo

Una vez determinada la incertidumbre asociada al proceso de calibración, el último paso consiste en propagar ésta hacia las variables recuperadas, temperatura y cantidad de cada especie. Sin embargo, al carecer de un modelo analítico, tendremos que recurrir a una estrategia basada en el método de Monte Carlo [89, 58], donde se lleva a cabo un cierto número M de simulaciones generadas aleatoriamente a partir de las distribuciones de probabilidad de las fuentes de incertidumbre de partida, en nuestro caso, realizaciones del proceso aleatorio gaussiano (con $\sigma = \sigma_{tot}$) con el que hemos modelado la incertidumbre en la radiancia. Para todas estas simulaciones se aplica el algoritmo de ajuste descrito en el capítulo 8, recuperándose las variables de interés, las cuales se distribuyen a lo largo de una determinada función de densidad de probabilidad que puede ser estimada. En la

práctica, hemos utilizado el estimador proporcionado por el *kernel* de *Epanechnikov* [21] disponible en MatLab, y que proporciona una estimación óptima en términos del error cuadrático medio.

En total se han ejecutado un total de 1000 iteraciones, donde las simulaciones empleadas tienen como valor nominal un espectro teórico característico de las medidas que hemos llevado a cabo sobre el quemador Bunsen, de temperatura igual a 2000 K y densidad de columna de CO_2 y CO de, respectivamente, $1000\text{ ppm} \cdot \text{m}$ y $200\text{ ppm} \cdot \text{m}$. Fruto de este proceso se obtienen las funciones de densidad de probabilidad que se muestran en la figura 10.7.

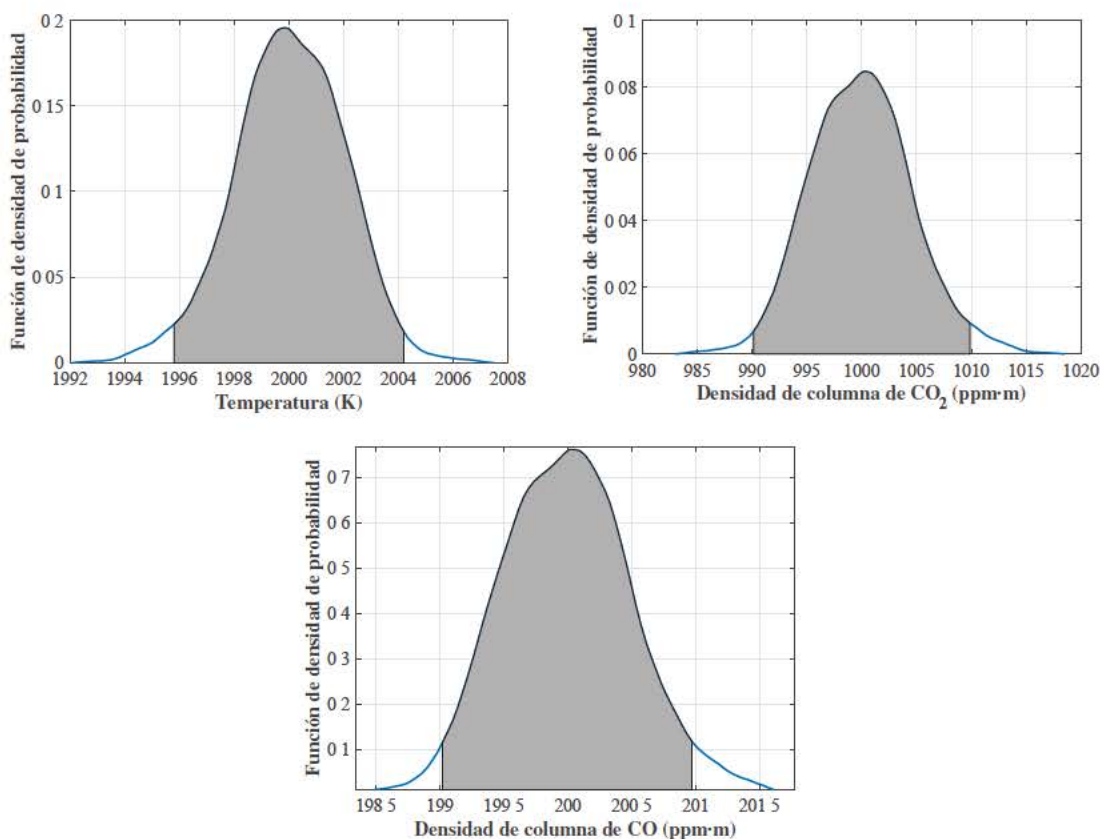


Figura 10.7: Resultado del método de Monte Carlo para la propagación de incertidumbres a las variables recuperadas en el proceso de ajuste iterativo. La estimación de la función de densidad de probabilidad basado en el *kernel* de *Epanechnikov*. En gris se muestra el intervalo de confianza del 95 %.

Si dichas funciones se aproximan por una distribución normal de media cero, podríamos obtener el grado de incertidumbre asociado a un determinado intervalo de confianza. Por ejemplo, para un 95 % obtendríamos un intervalo de confianza de aproximadamente 10 K ($\pm 5\text{ K}$) en el caso de la temperatura, de $20\text{ ppm} \cdot \text{m}$ ($\pm 10\text{ ppm} \cdot \text{m}$) en la densidad de columna del CO_2 , y de $2\text{ ppm} \cdot \text{m}$ ($\pm 1\text{ ppm} \cdot \text{m}$) en el caso del CO .

Tras las pruebas realizadas, se ha comprobado como el algoritmo de ajuste iterativo proporciona una gran robustez frente al ruido espectralmente decorrelado, debido fun-

damentalmente al uso de una región espectral relativamente ancha, donde los valores recuperados constituyen la solución óptima en términos del error global. Sin embargo, no sucede lo mismo con las fuentes de ruido espectralmente correladas, ya que su efecto ocasiona una alteración de la línea base, que resulta particularmente perjudicial en la recuperación de la temperatura. Esta es la razón por la que otros autores que implementan técnicas de medida análogas a la nuestra, como en el caso de [98], señalan a las incertidumbres provenientes del proceso de calibración como las responsables de la mayor parte de los errores cometidos por su método.

PARTE V:

CONCLUSIONES

Análisis de resultados

Este último capítulo tiene como principal objetivo sintetizar los hitos alcanzados y las contribuciones realizadas, como fruto del trabajo desarrollado en la presente tesis doctoral. De igual forma, es necesario evaluar el cumplimiento de los objetivos específicos enunciados en el capítulo 1, estableciendo las relaciones correspondientes entre estos y los resultados finalmente alcanzados tras el proceso de investigación. Siguiendo la misma estructura lógica que hemos empleado en el resto del documento, el análisis estará subdividido en cada una de las cuatro partes que conforman este trabajo.

Parte I. Teledetección de gases mediante imagen infrarroja

En primer lugar, se ha llevado a cabo la descripción del problema físico de la teledetección de gases, expresado éste en términos de la **ecuación de transferencia radiativa** que gobierna su comportamiento radiativo y su interacción con la radiación externa incidente. De este análisis se infieren diferentes principios de detección y, de afrontar el problema de la cuantificación a distancia, lo que se traduce en la búsqueda de una estrategia que permita la separabilidad entre las variables **temperatura** y **densidad de columna** a través del análisis espectral.

Como una primera aproximación al objetivo principal, se ha tratado el caso de la detección de gases mediante sensores de imagen infrarroja de banda integrada, lo cual nos ha permitido estudiar un problema de gran interés práctico a partir de un planteamiento más simple, mediante un esquema de detección carente de resolución espectral. En esta fase se han construido modelos radiométricos mediante computador que han permitido tanto el diseño de estrategias de detección como la estimación de sus prestaciones, a través de figuras de mérito como la concentración mínima detectable. En concreto, se ha propuesto una arquitectura basada en lo que se denomina **detección activa**, provista de una fuente de iluminación IR adicional, que resulta de especial interés en aquellas aplicaciones en las que el contraste térmico entre la fuga y el fondo no puede garantizarse. Un ejemplo particularmente representativo de esta situación lo encontramos en el análisis de estanqueidad de depósitos de combustible mediante gases traza, dentro del sector aeronáutico. En este caso, se han culminado las labores de diseño y modelado teórico con la fabricación de un prototipo validador de la metodología propuesta, que ha sido probado con éxito en casos de uso característicos.

Parte II. Imagen hiperespectral en el infrarrojo medio mediante transformada de Fourier

El problema de estimar la cantidad de gas a distancia y con precisión se enfrenta con la indeterminación producida por el acoplamiento entre las variables emisividad y temperatura, con respecto a la radiación detectada en una única longitud de onda. Ante esta situación, la estrategia abordada consiste en el uso de sistemas dotados de resolución espectral suficiente como para resolver la estructura fina de los compuestos a detectar, como es el caso de los denominados **sistemas de imagen hiperespectral**.

Se ha dispuesto de un espectrorradiómetro de imagen basado en transformada de Fourier, operando en la región del infrarrojo medio. Este sistema nos proporciona “cubos de datos” formados por los interferogramas correspondientes a cada píxel, por lo que ha sido necesario el desarrollo de funciones de procesado, algunas propias de la interferometría clásica y otras particulares de un sistema de imagen, para la construcción de espectros.

Una vez concluidas las labores de puesta a punto, se ha propuesto una metodología de medida basada en el ajuste iterativo de espectros experimentales mediante simulaciones teóricas, donde las variables temperatura y densidad de columna se obtienen como parte de la resolución de un problema de optimización, maximizando el grado de ajuste entre las componentes sintéticas y las experimentales. Para ello es necesario un entorno de simulación de modelos radiométricos (LBLRTM, *Line-By-Line Radiative Transfer Model*) ágil y preciso, que también incluya los efectos instrumentales. Esta aproximación se ha validado de forma experimental a través de un experimento sencillo, y ha sido aplicada a problemas actuales como es el caso de las emisiones procedentes de un vehículo Diesel.

Parte III. Reducción de la complejidad y uso eficiente de la información

A lo largo de esta parte del trabajo se ha abordado el problema de la **alta dimensionalidad** característica de los sistemas de imagen hiperespectral. En este caso nuestra hipótesis de trabajo no sólo abarcaba la posibilidad de reducir de forma notable el volumen de datos necesario, sino que yendo un paso más allá, hemos extraído la baja dimensionalidad intrínseca de los datos experimentales para construir una metodología de ajuste más eficiente. Se ha demostrado como el uso de **sub-espacios de señal** contruidos exclusivamente a partir de espectros sintéticos y el **análisis por componentes principales** permiten una representación comprimida de los espectros experimentales que, a la vez, proporciona un filtrado del ruido. Una vez que estos se han expresado en las componentes adecuadas, fueron exploradas alternativas que, aprovechando dicha representación, proveyesen la recuperación de las variables temperatura y densidad de columna de forma eficaz. Fueron evaluadas diferentes estrategias, como la aproximación mediante redes neuronales o el uso de técnicas de regresión no lineal a partir de SVR- ϵ (*Support Vector Regression*) o GRNN (*Generalized Regression Neural Network*), y comparadas en términos del grado de similitud obtenido frente a los resultados del método de ajuste iterativo. Finalmente, las mejores prestaciones fueron alcanzadas con la metodología basada en la compresión mediante componentes principales junto al uso de GRNN, para la recuperación de la densidad de columna y especialmente de la temperatura, dada la baja sensibilidad que presenta la transmitancia frente a este parámetro.

Esta metodología supone una reducción notable de la dimensionalidad, y, por tanto de

los recursos y tiempos de computación necesarios, a la vez que las variables son recuperadas con un buen grado de acuerdo con el método iterativo validado experimentalmente. Sin embargo, todavía es posible alcanzar mayor eficiencia interviniendo en el proceso de obtención de los espectros a partir de los interferogramas adquiridos. Partiendo del hecho de que estos habitualmente contienen un alto grado de sobremuestreo y de que el ruido es predominantemente blanco, nuestra propuesta se resume en un **algoritmo de recombinación de muestras** que, mediante la generación de versiones procedentes del diezmado, lleva a cabo las correcciones de fase pertinentes de forma tal que el espectro obtenido sea equivalente, en términos de relación señal a ruido, al que se obtuviese si las muestras procedieran de espectros adquiridos de forma independiente, en distintos barridos del interferómetro. Esto permite un mejor aprovechamiento de las muestras ya adquiridas, que ahora son empleadas para reducir el nivel de ruido presente en los interferogramas experimentales, lo que también redundará en una disminución de los tiempos de adquisición necesarios.

Parte IV. Aplicación al campo de la metrología

Los trabajos realizados en los apartados anteriores han proporcionado las bases necesarias para abordar un problema metrológico difícil como es la medida de altas temperaturas (>2400 K) en procesos de combustión. En particular, la técnica de detección empleada ha sido la **espectroscopia de emisión** en el infrarrojo, puesta en práctica mediante el equipo de imagen hiperespectral ya utilizado.

El estudio de este tipo de procesos pone de manifiesto las dificultades inherentes al uso de sistemas interferométricos para la medida de fenómenos dinámicos. Tras el análisis del impacto que, sobre la modulación propia del interferómetro, introduce una modulación temporal actuando sobre la radiación entrante, se ha presentado un método para la corrección del término de carácter *convolutivo* (cruzado) ocasionado por las **fluctuaciones temporales** de la fuente de radiación.

Finalmente, la aplicación de gran parte de las técnicas desarrolladas en este trabajo (como la metodología de ajuste iterativo, las etapas de procesamiento espectral, la corrección de fluctuaciones temporales, o la calibración radiométrica) ha permitido el desarrollo de un método para la recuperación de la temperatura con un nivel de incertidumbre de ± 5 K, valor estimado a partir del método de Monte Carlo. Así, nuestro trabajo concluye con la obtención de mapas (imágenes) con la distribución espacial de la temperatura y la densidad de columna de las principales especies (CO_2 y CO).

Conclusiones finales

A la vista de los resultados obtenidos, podemos concluir que los objetivos iniciales descritos en el comienzo de esta memoria han sido satisfechos, e incluso se han visto superados durante el transcurso del trabajo realizado. Las hipótesis de trabajo que se formularon han sido probadas con éxito, y se han establecido los límites de aplicación para las mismas.

A modo de reflexión final, este periodo de investigación puede considerarse como un intento de solventar algunas de las principales dificultades inherentes a los sistemas de imagen hiperespectral por transformada de Fourier, con el objetivo implícito de propiciar

un uso más extensivo de estos equipos. Su reciente aparición unida a su elevado potencial sugieren la existencia de un amplio margen de evolución, en el que se prevé que las limitaciones prácticas actuales den paso a su consolidación como una alternativa viable para una gran cantidad de desafíos aún por determinar, dentro el ámbito de la teledetección.

Por último, mencionaremos que la intersección de disciplinas en la que se ubica este trabajo ha supuesto uno de los mayores retos a los que nos hemos enfrentado, aunque al mismo tiempo podemos señalar a la heterogeneidad de ese contexto como el origen de gran parte de las contribuciones realizadas. La búsqueda de analogías, la aplicación de técnicas y puntos de vista provenientes de otros campos, así como las incursiones realizadas en áreas de conocimiento circundantes, han enriquecido este trabajo y ponen de manifiesto la utilidad de su planteamiento. Queda la puerta abierta al uso de nuevos enfoques tanto sobre los aspectos tratados como sobre otros de igual interés y que en el futuro puedan derivarse, de forma que se obtenga un provecho real de las contribuciones realizadas.

Lista de contribuciones

Curriculum vitae

Miguel Ángel Rodríguez Conejo es Ingeniero de Telecomunicación por la Universidad Carlos III de Madrid (2010), habiendo cursado en el mismo centro los estudios de postgrado correspondientes al Máster en Robótica y Automatización (2012), que proporciona acceso directo al Programa de Doctorado en Ingeniería Eléctrica, Electrónica y Automática. Desde el año 2010 forma parte del grupo de investigación del Laboratorio de Sensores, Teledetección e Imagen IR, dentro del Departamento de Física de la Universidad Carlos III de Madrid, y desde el año 2012 desempeña las tareas de investigador FPI.

Contribuciones realizadas

Los principales resultados expuestos en el capítulo 3 (*Teledetección activa de gases*) han sido publicados en:

- RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., MELÉNDEZ, J., BARBER, R., AND GARRIDO, S. Design of an infrared imaging system for robotic inspection of gas leaks in industrial environments. *Int J Adv Robot Syst* 12 (2015), 23.
- RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., MELÉNDEZ, J., AND LÓPEZ, F. Aircraft fuel tank leaks inspection through spectral infrared imaging of gases. In *AeroNDT 2014, 6th Symposium Non Destructive Testing in Aerospace* (Feb 2015).

Los resultados correspondientes al capítulo 5 (*Cuantificación de gases mediante imagen hiperespectral*) han dado lugar a la siguiente publicación científica:

- RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., AND MELÉNDEZ, J. Hyperspectral quantitative imaging of gas sources in the mid-infrared. *Appl. Opt.* 54, 2 (Jan 2015), 141–149.

En estrecha relación con los trabajos anteriores, el autor es co-inventor de la siguiente patente concedida por la OEPM:

- RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., CORTÉS, F., MELÉNDEZ, J., AND LÓPEZ, F. Método y dispositivo para la detección y medida de la concentración de gases, 2014. Oficina Española de Patentes y Marcas, CIPG01N21/35.

Los resultados experimentales obtenidos en la parte correspondiente a la aplicación al campo de la metrología, y en especial los descritos en el capítulo 10, han sido presentados a la comunidad científica en forma de participación en el siguiente congreso:

- RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., GUARNIZO, G., MELÉNDEZ, J., AND LOPEZ, F. Measurement of temperature and gas concentration in a flame based on a hyperspectral infrared imager. In *TEMPMEKO 2016* (Jun 2016).

Mientras que las contribuciones concernientes a los capítulos 6, 7 y 9 se encuentran aún en fase de publicación en revistas científicas de interés.

Otras contribuciones relevantes son:

- RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., FERNÁNDEZ, A., CORTÉS, F., AND LÓPEZ, F. Design of an enhanced MEIGA-MetNet dust micro-sensor able to perform gas sensing in Mars atmosphere. In *Electron Devices (CDE), 2015 10th Spanish Conference on* (Feb 2015), pp. 1–4.
- MELÉNDEZ, J., AND RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A. Hyperspectral imaging of exhaust gases of combustion engines. In *Telops European Scientific Workshop 2011* (October 2011), pp. 1–4.

Participación en proyectos de investigación

Los proyectos de investigación más destacados en los que el autor de este trabajo ha participado, como miembro del grupo LIR-UC3M, son:

- EMPRESS: ENHANCING PROCESS EFFICIENCY THROUGH IMPROVED TEMPERATURE. Organismo financiador: EMPIR Programme, Comisión Europea (H2020). Ref.: 14IND04 EMPRESS. Entidades participantes: 18 partners. Periodo de ejecución: Mayo 2015–abril 2018.
- CREACIÓN DE UN SISTEMA MULTICARRIL DE DETECCIÓN DE LAS EMISIONES Y CONSUMOS DEL TRÁFICO CIRCULANTE. Organismo financiador: MICINN. IPT-310000-2010-31. Entidades participantes: OPIs: U. Carlos III, CIEMAT; Empresas: Technet, TEVA, TELVENT. Periodo de ejecución previsto: 2010-2013.
- CIENCIA Y TECNOLOGÍA PARA LA CARACTERIZACIÓN IN-SITU DE LA ATMÓSFERA DE MARTE. DESARROLLO DEL INSTRUMENTO DUST SENSOR PARA LA MISIÓN EXOMARS18 DE ESA/IKI. FASES A/B Y C/D. Entidad Financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad. Proyecto de Investigación Nacional. Año Inicio: 2016, Año Fin: 2018.
- SENSOR DE POLVO MARCIANO MEIGA-METNET. BASADO EN UN MICRO-SENSOR ESPECTRAL INFRARROJO Y EN UN BARREDOR DE POLVO. Organismo financiador: MICINN. AYA2009-14212-C05-02. Entidades participantes: INTA, UCM. U. Carlos III, Univ. de Sevilla. Periodo de ejecución previsto: 01/01/2010-31/12/2011.

Bibliografía

- [1] Support vector machines | perpetual enigma. <https://prateekvjoshi.com/2012/08/24/support-vector-machines/>. (Accessed on 10/04/2016).
- [2] ALLEN, H. C., AND CROSS, P. C. *Molecular Vib-rotors: The Theory and Interpretation of High Resolution Infrared Spectra*, first ed. John Wiley & Sons Inc, 12 1963.
- [3] ARFKEN, G. B., WEBER, H. J., AND HARRIS, F. E. Chapter 22 - Calculus of Variations. In *Mathematical Methods for Physicists (Seventh Edition)*, G. B. Arfken, H. J. Weber, and F. E. Harris, Eds., seventh edition ed. Academic Press, Boston, 2013, pp. 1081 – 1124.
- [4] BALANIS, C. A. *Antenna Theory: Analysis and Design*. Wiley-Interscience, 2005.
- [5] BANWELL, C. N., AND MCCASH, E. M. *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, 4 sub ed. Mcgraw-Hill College, 6 1994.
- [6] BARZ, T., BONOW, G., HEGENBERG, J., HABIB, K., CRAMAR, L., WELLE, J., SCHULZ, D., KROLL, A., AND SCHMIDT, L. Unmanned inspection of large industrial environments. In *Future Security*. Springer, 2012, pp. 216–219.
- [7] BELLMAN, R. E. *Dynamic Programming*. Dover Publications, Incorporated, 2003.
- [8] BOOTH, R., BRAULT, J., LABEYRIE, A., AND FÜR ASTROPHYSIK UND ASTRONOMIE, S. G. *High resolution in astronomy: Fifteenth Advanced Course of the Swiss Society of Astronomy and Astrophysics*. Advanced Course of the Swiss Society of Astronomy and Astrophysics. Geneva Observatory, 1985.
- [9] BOSER, B. E., GUYON, I. M., AND VAPNIK, V. N. A training algorithm for optimal margin classifiers. In *Proceedings of the Fifth Annual Workshop on Computational Learning Theory* (New York, NY, USA, 1992), COLT '92, ACM, pp. 144–152.
- [10] BRADLEY, K. C. Midwave infrared imaging Fourier transform spectrometry of combustion plumes. Tech. rep., DTIC Document, 2009.
- [11] BRADLEY, K. C., BOWEN, S., GROSS, K. C., MARCINIAK, M. A., AND PERRAM, G. P. Imaging Fourier transform spectrometry of jet engine exhaust with the telops FIRST-MWE. In *2009 IEEE Aerospace conference* (March 2009), pp. 1–8.
- [12] BRAULT, J. A high precision Fourier spectrometer for the visible. In *Auxiliary Instrumentation for Large Telescopes* (June 1972), S. Laustsen and A. Reiz, Eds., pp. 367–373.

- [13] BURGARD, D. A., BISHOP, G. A., STADTMULLER, R. S., DALTON, T. R., AND STEDMAN, D. H. Spectroscopy applied to on-road mobile source emissions. *Appl. Spectrosc.* 60, 5 (May 2006), 135A–148A.
- [14] BURKERT, P., FERGG, F., AND FISCHER, H. A Compact High-Resolution Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* GE-21, 3 (July 1983), 345–349.
- [15] CHAMBERLAND, M., FARLEY, V., VALLIÈRES, A., VILLEMAIRE, A., BELHUMEUR, L., GIROUX, J., AND LEGAULT, J.-F. High-performance field-portable imaging radiometric spectrometer technology for hyperspectral imaging applications. vol. 5994, pp. 59940N–59940N–11.
- [16] CHANG, C.-C., AND LIN, C.-J. LIBSVM: A library for support vector machines. *ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology* 2 (2011), 27:1–27:27. Software available at <http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm>.
- [17] CHERKASSKY, V., AND MA, Y. *Artificial Neural Networks — ICANN 2002: International Conference Madrid, Spain, August 28–30, 2002 Proceedings*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2002.
- [18] DAVIS, S. M., LANDGREBE, D. A., PHILLIPS, T. L., SWAIN, P. H., HOFFER, R. M., LINDENLAUB, J. C., AND SILVA, L. F. Remote sensing: the quantitative approach. *New York, McGraw-Hill International Book Co.*, 1978. 405 p. 1 (1978).
- [19] DUDA, R. O., HART, P. E., AND STORK, D. G. *Pattern Classification (2Nd Edition)*. Wiley-Interscience, 2000.
- [20] DUPUY J., VACHET P., MARÉCHAL J., MELÉNDEZ J., AND DE CASTRO A. J. Thermal infrared emission–transmission measurements in flames from a cylindrical forest fuel burner. *International Journal of Wildland Fire* 16, 3 (2007), 324–340.
- [21] EPANECHNIKOV, V. A. Non-parametric estimation of a multivariate probability density. *Theory of Probability & Its Applications* 14, 1 (1969), 153–158.
- [22] FARLEY, V., CHAMBERLAND, M., VALLIÈRES, A., VILLEMAIRE, A., AND LEGAULT, J.-F. Radiometric calibration stability of the FIRST: a longwave infrared hyperspectral imaging sensor. vol. 6206, pp. 62062A–62062A–11.
- [23] FARLEY, V., VALLIÈRES, A., CHAMBERLAND, M., VILLEMAIRE, A., AND LEGAULT, J.-F. Performance of the FIRST: a long-wave infrared hyperspectral imaging sensor. vol. 6398, pp. 63980T–63980T–11.
- [24] FELLGETT, P. B. On the ultimate sensitivity and practical performance of radiation detectors. *J. Opt. Soc. Am.* 39, 11 (Nov 1949), 970–976.
- [25] FLIR SYSTEMS. Arrays of infrared detectors. <http://www.flir.com/cores/display/?id=51939>. (Accessed on 10/05/2016).

- [26] FLIR SYSTEMS. FLIR GF300 / GF320 Infrared Cameras for Gas Leak Detection and Electrical Inspections | FLIR Systems. <http://www.flir.com/ogi/display/?id=55671>. (Accessed on 10/06/2016).
- [27] FREI, S. *Capture and Transmission of Signal Data from Infrared Detectors Using a Micro-controller and Graphical Display of Received Data in a Windows Environment*. 2009.
- [28] FRISH, M., WAINNER, R., STAFFORD-EVANS, J., GREEN, B., ALLEN, M., CHANCEY, S., RUTHERFORD, J., MIDGLEY, G., AND WEHNERT, P. Standoff sensing of natural gas leaks: evolution of the remote methane leak detector (RMLD). In *Quantum Electronics and Laser Science Conference, 2005. QELS '05* (2005), vol. 3, pp. 1941–1943 vol. 3.
- [29] FRISH, M. B., WAINNER, R. T., STAFFORD-EVANS, J., GREEN, B. D., ALLEN, M. G., CHANCEY, S., RUTHERFORD, J., MIDGLEY, G., AND WEHNERT, P. Standoff Sensing of Natural Gas Leaks: Evolution of the Remote Methane Leak Detector (RMLD). In *Conference on Lasers and Electro-Optics/Quantum Electronics and Laser Science and Photonic Applications, Systems and Technologies* (2005), Optical Society of America, p. JThF3.
- [30] GAGNON, J.-P., HABTE, Z., GEORGE, J., FARLEY, V., TREMBLAY, P., CHAMBERLAND, M., ROMANO, J., AND ROSARIO, D. Hyper-Cam automated calibration method for continuous hyperspectral imaging measurements. In *Active and Passive Signatures* (Apr. 2010), vol. 7687, pp. 76870E–76870E–12.
- [31] GAGNON, M.-A., TREMBLAY, P., SAVARY, S., DUVAL, M., FARLEY, V., AND CHAMBERLAND, M. Airborne midwave and longwave infrared hyperspectral imaging of gases. vol. 9106, pp. 91060C–91060C–11.
- [32] GALLAGHER, N. B., WISE, B. M., AND SHEEN, D. M. Estimation of trace vapor concentration-pathlength in plumes for remote sensing applications from hyperspectral images. *Analytica Chimica Acta* 490, 1–2 (2003), 139 – 152. Papers presented at the 8th International Conference on Chemometrics and Analytical Chemistry.
- [33] GILO, M., AND AZRAN, A. Low reflectance DLC coatings on various IR substrates. vol. 8353, pp. 835320–835320–8.
- [34] GRIFFITHS, P., AND DE HASETH, J. *Fourier Transform Infrared Spectrometry*. Chemical Analysis: A Series of Monographs on Analytical Chemistry and Its Applications. Wiley, 2007.
- [35] GROSS, K. C., BRADLEY, K. C., AND PERRAM, G. P. Remote Identification and Quantification of Industrial Smokestack Effluents via Imaging Fourier-Transform Spectroscopy. *Environmental Science Technology* 44 (Dec. 2010), 9390–9397.
- [36] GROSS, K. C., TREMBLAY, P., BRADLEY, K. C., CHAMBERLAND, M., FARLEY, V., AND PERRAM, G. P. Instrument calibration and lineshape modeling for ultraspectral imagery measurements of industrial smokestack emissions. vol. 7695, pp. 769516–769516–13.

- [37] GROSS, K. C., TREMBLAY, P., BRADLEY, K. C., CHAMBERLAND, M., FARLEY, V., AND PERRAM, G. P. Instrument calibration and lineshape modeling for ultraspectral imagery measurements of industrial smokestack emissions. vol. 7695, pp. 769516–769516–13.
- [38] HALL, D. N. B., RIDGWAY, S., BELL, E. A., AND YARBOROUGH, J. M. A 1.4 Meter Fourier Transform Spectrometer For Astronomical Observations. vol. 0172, pp. 121–129.
- [39] HARLEY, J. L., AND GROSS, K. C. Remote quantification of smokestack effluent mass flow rates using imaging Fourier transform spectrometry. vol. 8018, pp. 801813–801813–13.
- [40] HAWKEYE TECHNOLOGIES. Manufacturer of Standard and Built-to-Specs IR Sources. <http://www.hawkeyetechnologies.com/>. (Accessed on 10/06/2016).
- [41] HAYDEN, A. F., AND NOLL, R. J. Remote trace gas quantification using thermal IR spectroscopy and digital filtering based on principal components of background scene clutter. vol. 3071, pp. 158–168.
- [42] HAYKIN, S. *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*, 2nd ed. Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, NJ, USA, 1998.
- [43] HEASLER, P., POSSE, C., HYLDEN, J., AND ANDERSON, K. Nonlinear bayesian algorithms for gas plume detection and estimation from hyper-spectral thermal image data. *Sensors* 7, 6 (2007), 905.
- [44] HERGET, W. F. Remote and cross-stack measurement of stack gas concentrations using a mobile FT-IR system. *Appl. Opt.* 21, 4 (Feb 1982), 635–641.
- [45] HERRES, W., AND GRONHOLZ, J. Understanding FT-IR data processing. *Part 1* (1984), 352–356.
- [46] HIGGINS, B., MCQUAY, M., LACAS, F., ROLON, J., DARABIHA, N., AND CANDEL, S. Systematic measurements of OH chemiluminescence for fuel-lean, high-pressure, premixed, laminar flames. *Fuel* 80, 1 (2001), 67 – 74.
- [47] HOLST, G. *Testing and Evaluation of Infrared Imaging Systems*. Press Monographs. JCD Pub., 1998.
- [48] HOLST, G. C. Minimum resolvable temperature predictions, test methodology, and data analysis. vol. 1157, pp. 208–219.
- [49] HOLST, G. C. *Common Sense Approach to Thermal Imaging (SPIE Press Monograph Vol. PM86)*, 1 ed. SPIE Publications, 9 2000.
- [50] HOLST, G. C. *Testing and evaluation of infrared imaging systems*. JCD Pub. Bellingham WA, Winter Park FL, 2008.

- [51] HORNIK, K., STINCHCOMBE, M., AND WHITE, H. Universal approximation of an unknown mapping and its derivatives using multilayer feedforward networks. *Neural networks* 3, 5 (1990), 551–560.
- [52] HOUGHTON, J. T. *The Physics of Atmospheres*, 1 ed. Cambridge University Press, 1979.
- [53] HUDSON, R. D. *Infrared system engineering / Richard D. Hudson, Jr.* New York ; Sydney : Wiley-Interscience, 1969. Includes bibliographies.
- [54] IFEACHOR, E. C., AND JERVIS, B. W. *Digital Signal Processing: A Practical Approach*, 2nd ed. Pearson Education, 2002.
- [55] JAGGI, N., AND VIJ, D. Fourier Transform Infrared Spectroscopy. In *Handbook of Applied Solid State Spectroscopy*, D. R. Vij, Ed. Springer US, 2006, pp. 411–450.
- [56] JENSEN, J. R. *Introductory Digital Image Processing: A Remote Sensing Perspective*, 2nd ed. Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, NJ, USA, 1995.
- [57] JOHNSON, J. Analysis of Image Forming Systems. In *Selected papers on infrared design. Part I and II* (1985), R. B. Johnson and W. L. Wolfe, Eds., vol. 513, p. 761.
- [58] JOINT COMMITTEE FOR GUIDES IN METROLOGY. JCGM 101: Evaluation of Measurement Data - Supplement 1 to the "Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement Propagation of Distributions Using a Monte Carlo Method. Tech. rep., JCGM, 2008.
- [59] KANUNGO, T., MOUNT, D. M., NETANYAHU, N. S., PIATKO, C. D., SILVERMAN, R., AND WU, A. Y. An efficient k-means clustering algorithm: Analysis and implementation. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* 24, 7 (July 2002), 881–892.
- [60] KAUPPINEN, J., AND PARTANEN, J. *Fourier Transform Spectroscopy (FTS)*. Wiley-VCH Verlag GmbH, 2002, pp. 77–108.
- [61] KEPPEL-ALEKS, G., TOON, G. C., WENNBERG, P. O., AND DEUTSCHER, N. M. Reducing the impact of source brightness fluctuations on spectra obtained by Fourier-transform spectrometry. *Appl. Opt.* 46, 21 (Jul 2007), 4774–4779.
- [62] KESTER, W. *Data conversion handbook*. Elsevier Newnes, Amsterdam, Boston, 2005.
- [63] KING, F. W. *Hilbert Transforms*, vol. 1. Cambridge University Press, 2009. Cambridge Books Online.
- [64] KOCHANOV, R., GORDON, I., ROTHMAN, L., WCISŁO, P., HILL, C., AND WILZEWSKI, J. HITRAN Application Programming Interface (HAPI): A comprehensive approach to working with spectroscopic data. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 177 (2016), 15 – 30. {XVIIIth} Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRus-2015), Tomsk, Russia.

- [65] KULATILAKA, W. D., LUCHT, R. P., HANNA, S. F., AND KATTA, V. R. Two-color, two-photon laser-induced polarization spectroscopy (LIPS) measurements of atomic hydrogen in near-adiabatic, atmospheric pressure hydrogen/air flames. *Combustion and Flame* 137, 4 (2004), 523 – 537.
- [66] LI, T., JUN'AN, L., AND JUANJUAN, S. *Future Intelligent Information Systems*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2011, ch. 16 Times Over-Sampling Technique Based on the ADC Module of StellarisTM Family of Chips, pp. 403–408.
- [67] LINSTROM, P. J., AND MALLARD, W. G., Eds. *NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69*. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899, June 2005.
- [68] LLOYD, G., HUGHES, I., BRATFALEAN, R., AND EWART, P. Broadband degenerate four-wave mixing of OH for flame thermometry. *Applied Physics B* 67, 1 (1998), 107–113.
- [69] LOUTFI, A., CORADESCHI, S., KARLSSON, L., AND BROXVALL, M. Putting olfaction into action: using an electronic nose on a multi-sensing mobile robot. In *Intelligent Robots and Systems, 2004. (IROS 2004). Proceedings. 2004 IEEE/RSJ International Conference on (2004)*, vol. 1, pp. 337–342 vol.1.
- [70] M. VOLLMER, K. P. M. *Industrial Application: Detection of Gases*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, New York, 2010.
- [71] MACK, P. E. *Viewing the Earth: The social construction of the Landsat satellite system*. MIT Press, 1990.
- [72] MANIKANTACHARI, K. R. V., RAGHAVAN, V., AND SRINIVASAN, K. Effects of burner configurations on the natural oscillation characteristics of laminar jet diffusion flames. *International Journal of Spray and Combustion Dynamics* 7, 3 (2015), 257–281.
- [73] MANOLAKIS, D., GOLOWICH, S., AND DIPIETRO, R. S. Long-Wave Infrared Hyperspectral Remote Sensing of Chemical Clouds: A focus on signal processing approaches. *IEEE Signal Processing Magazine* 31, 4 (July 2014), 120–141.
- [74] MAXWORTHY, T. The flickering candle: transition to a global oscillation in a thermal plume. *Journal of Fluid Mechanics* 390 (7 1999), 297–323.
- [75] MELÉNDEZ, J., AND RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A. Hyperspectral imaging of exhaust gases of combustion engines. In *Telops European Scientific Workshop 2011 (October 2011)*, pp. 1–4.
- [76] MELÉNDEZ, J., FORONDA, A., ARANDA, J. M., LÓPEZ, F., AND DEL CERRO, F. J. L. Infrared thermography of solid surfaces in a fire. *Measurement Science and Technology* 21, 10 (2010), 105504.
- [77] MERTZ, L. Spectromètre stellaire multicanal. *J. Phys. Radium* 19, 3 (1958), 233–236.

- [78] MERTZ, L. Rapid scanning Fourier transform spectrometry. *J. Phys. Colloques* 28 (1967), C2–87–C2–90.
- [79] MILLER, J. *Principles of infrared technology: a practical guide to the state of the art*. Electrical Engineering. Van Nostrand Reinhold, 1994.
- [80] MORÉ, J. The Levenberg-Marquardt algorithm: Implementation and theory. In *Numerical Analysis*, G. A. Watson, Ed., vol. 630 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer Berlin Heidelberg, 1978, ch. 10, pp. 105–116.
- [81] MSA. *Gas Detection Handbook: Key concepts and reference material for permanently installed gas monitoring systems*, fourth edition ed. 2006.
- [82] NATARAJAN, B., KONSTANTINIDES, K., AND HERLEY, C. Occam filters for stochastic sources with application to digital images. In *Image Processing, 1996. Proceedings., International Conference on (Sep 1996)*, vol. 1, pp. 399–402 vol.1.
- [83] NELDER, J. A., AND MEAD, R. A simplex method for function minimization. *The Computer Journal* 7, 4 (1965), 308–313.
- [84] NICODEMUS, F. E. *Radiance*. Defense Technical Information Center, 1962.
- [85] NIU, S., GOLOWICH, S. E., INGLE, V. K., AND MANOLAKIS, D. G. Hyperspectral chemical plume quantification and temperature estimation. vol. 9088, pp. 90880V–90880V–8.
- [86] O’NEILL, R. Algorithm as 47: Function minimization using a simplex procedure. *Journal of the Royal Statistical Society. Series C (Applied Statistics)* 20, 3 (1971), 338–345.
- [87] OPGAL. Infrared gas leak detector - EyeCGas. <http://www.opgal.com/app/general/gas-imaging-cameras/>. (Accessed on 10/06/2016).
- [88] OPPENHEIM, A. V., AND SCHAFER, R. W. *Discrete-time Signal Processing*. Prentice-Hall, Inc., Upper Saddle River, NJ, USA, 1989.
- [89] PAPADOPOULOS, C. E., AND YEUNG, H. Uncertainty estimation and Monte Carlo simulation method. *Flow Measurement and Instrumentation* 12, 4 (2001), 291 – 298.
- [90] PEARCE, J., EDLER, F., ELLIOTT, C., ROSSO, L., SUTTON, G., ZANTE, R., AND MACHIN, G. A European project to enhance process efficiency through improved temperature measurement: EMPRESS. In *17th International Congress of Metrology (2015)*, EDP Sciences, p. 08001.
- [91] PICCARDI, M. Background subtraction techniques: a review. In *Systems, Man and Cybernetics, 2004 IEEE International Conference on (Oct 2004)*, vol. 4, pp. 3099–3104 vol.4.
- [92] PRENGLE, H. W., MORGAN, C. A., FANG, C.-S., HUANG, L.-K., CAMPANI, P., AND WU, W. W. Infrared remote sensing and determination of pollutants in gas plumes. *Environmental Science & Technology* 7, 5 (1973), 417–423. PMID: 22283533.

- [93] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T., AND FLANNERY, B. P. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*, 3 ed. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2007.
- [94] PRIOR, S. A., RUNION, G. B., MARBLE, S. C., ROGERS, H. H., GILLIAM, C. H., AND TORBERT, H. A. A review of elevated atmospheric CO₂ effects on plant growth and water relations: implications for horticulture. *HortScience* 46, 2 (2011), 158–162.
- [95] PUDIL, P., AND HOVOVICOVA, J. Novel methods for subset selection with respect to problem knowledge. *IEEE Intelligent Systems and their Applications* 13, 2 (Mar 1998), 66–74.
- [96] RAO, K. *Spectroscopy of the earth's Atmosphere and interstellar Medium*. Elsevier Science, 2012.
- [97] REVERCOMB, H. E., BUIJS, H., HOWELL, H. B., LAPORTE, D. D., SMITH, W. L., AND SROMOVSKY, L. A. Radiometric calibration of IR Fourier transform spectrometers: solution to a problem with the High-Resolution Interferometer Sounder. *Appl. Opt.* 27, 15 (Aug 1988), 3210–3218.
- [98] RHOBY, M. R., BLUNCK, D. L., AND GROSS, K. C. Mid-IR hyperspectral imaging of laminar flames for 2-D scalar values. *Opt. Express* 22, 18 (Sep 2014), 21600–21617.
- [99] RIDDER, T., WARNEKE, T., AND NOTHOLT, J. Source brightness fluctuation correction of solar absorption Fourier transform mid infrared spectra. *Atmospheric Measurement Techniques* 4, 6 (2011), 1045–1051.
- [100] RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., CORTÉS, F., MELÉNDEZ, J., AND LÓPEZ, F. Método y dispositivo para la detección y medida de la concentración de gases, 2014.
- [101] RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., FERNÁNDEZ, A., CORTÉS, F., AND LÓPEZ, F. Design of an enhanced MEIGA-MetNet dust micro-sensor able to perform gas sensing in Mars atmosphere. In *Electron Devices (CDE), 2015 10th Spanish Conference on* (Feb 2015), pp. 1–4.
- [102] RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., GUARNIZO, G., MELÉNDEZ, J., AND LOPEZ, F. Measurement of temperature and gas concentration in a flame based on a hyperspectral infrared imager. In *TEMPMEKO 2016* (Jun 2016).
- [103] RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., AND MELÉNDEZ, J. Hyperspectral quantitative imaging of gas sources in the mid-infrared. *Appl. Opt.* 54, 2 (Jan 2015), 141–149.
- [104] RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., MELÉNDEZ, J., BARBER, R., AND GARRIDO, S. Design of an infrared imaging system for robotic inspection of gas leaks in industrial environments. *Int J Adv Robot Syst* 12 (2015), 23.
- [105] RODRÍGUEZ-CONEJO, M. A., MELÉNDEZ, J., AND LÓPEZ, F. Aircraft fuel tank leaks inspection through spectral infrared imaging of gases. In *AeroNDT 2014, 6th Symposium Non Destructive Testing in Aerospace* (Feb 2015).

- [106] ROGALSKI, A. History of infrared detectors. *Opto-Electronics Review* 20, 3 (2012), 279–308.
- [107] ROTHMAN, L., GORDON, I., BABIKOV, Y., BARBE, A., BENNER, D. C., BERNATH, P., BIRK, M., BIZZOCCHI, L., BOUDON, V., BROWN, L., CAMPARGUE, A., CHANCE, K., COHEN, E., COUDERT, L., DEVI, V., DROUIN, B., FAYT, A., FLAUD, J.-M., GAMACHE, R., HARRISON, J., HARTMANN, J.-M., HILL, C., HODGES, J., JACQUEMART, D., JOLLY, A., LAMOUROUX, J., ROY, R. L., LI, G., LONG, D., LYULIN, O., MACKIE, C., MASSIE, S., MIKHAILENKO, S., MÜLLER, H., NAUMENKO, O., NIKITIN, A., ORPHAL, J., PEREVALOV, V., PERRIN, A., POLOVTSEVA, E., RICHARD, C., SMITH, M., STARIKOVA, E., SUNG, K., TASHKUN, S., TENNYSON, J., TOON, G., TYUTEREV, V., AND WAGNER, G. The {HITRAN2012} molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 130 (2013), 4 – 50. {HITRAN2012} special issue.
- [108] ROTHMAN, L., GORDON, I., BARBER, R., DOTHE, H., GAMACHE, R., GOLDMAN, A., PEREVALOV, V., TASHKUN, S., AND TENNYSON, J. Hitemp, the high-temperature molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 111, 15 (2010), 2139 – 2150. {XVIth} Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRus-2009)XVIth Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy.
- [109] SABBAB, S., RUSCH, P., GERHARD, J.-H., STÖCKLING, C., EICHMANN, J., AND HARIG, R. Remote sensing of gases by hyperspectral imaging: results of measurements in the hamburg port area. vol. 8186, pp. 81860S–81860S–9.
- [110] SCHNAPF, A. The TIROS Decade. *IEEE Spectr.* 6, 7 (July 1969), 53–59.
- [111] SCHOLKOPF, B., AND SMOLA, A. J. *Learning with Kernels: Support Vector Machines, Regularization, Optimization, and Beyond*. MIT Press, Cambridge, MA, USA, 2001.
- [112] SCHOTT, J. R. *Remote sensing*. Oxford University Press, 2007.
- [113] SCHRENK, W. G. *Flame Emission Spectroscopy*. Springer US, Boston, MA, 1975, pp. 211–242.
- [114] SCHWEIZERISCHE GESELLSCHAFT FÜR ASTROPHYSIK UND ASTRONOMIE. ADVANCED COURSE SAAS-FEE, S., BOOTH, R. S. R. S., BRAULT, J. W. J. W., LABEYRIE, A. A., AND BENZ, A. O. High resolution in astronomy : Fifteenth advanced course of the swiss society of astronomy and astrophysics (member society of the swiss national academy of science), 1985. Bibliography: p. 217.
- [115] SIMMONS, G. F., ET AL. *Ecuaciones diferenciales: con aplicaciones y notas históricas*, Segunda ed. McGraw-Hill Interamericana, 1993.
- [116] SMOLA, A. J., AND SCHÖLKOPF, B. A tutorial on support vector regression. *Statistics and Computing* 14, 3 (Aug. 2004), 199–222.

- [117] SOLDAN, S., BONOW, G., AND KROLL, A. Robogasinspector – a mobile robotic system for remote leak sensing and localization in large industrial environments: Overview and first results. In *Proceedings of the 2012 IFAC Workshop on Automatic Control in Offshore Oil and Gas Production* (Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway, 2012), pp. 33–38.
- [118] SPECHT, D. F. Probabilistic neural networks. *Neural Netw.* 3, 1 (Jan. 1990), 109–118.
- [119] SPECHT, D. F. A general regression neural network. *Trans. Neur. Netw.* 2, 6 (Nov. 1991), 568–576.
- [120] STERNBERG, S. R. Biomedical image processing. *Computer* 16, 1 (Jan 1983), 22–34.
- [121] STONE, J. V. *Independent Component Analysis: A Tutorial Introduction*. MIT Press, Cambridge, MA, USA, 2004.
- [122] SUTTON, G., LEVICK, A., EDWARDS, G., AND GREENHALGH, D. A combustion temperature and species standard for the calibration of laser diagnostic techniques. *Combustion and Flame* 147, 1–2 (2006), 39 – 48.
- [123] TARANTOLA, A. *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 2004.
- [124] TASHKUN, S., AND PEREVALOV, V. Cdsd-4000: High-resolution, high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 112, 9 (2011), 1403 – 1410.
- [125] TIAN, J., GAZARIK, M. J., REISSE, R. A., AND JOHNSON, D. G. GIFTS SM EDU Level 1B algorithms.
- [126] TOURIN, R. H., AND KRAKOW, B. Applicability of Infrared Emission and Absorption Spectra to Determination of Hot Gas Temperature Profiles. *Appl. Opt.* 4, 2 (Feb 1965), 237–242.
- [127] TREMBLAY, P., SAVARY, S., ROLLAND, M., VILLEMAIRE, A., CHAMBERLAND, M., FARLEY, V., BRAULT, L., GIROUX, J., ALLARD, J.-L., DUPUIS, R., AND PADIA, T. Standoff gas identification and quantification from turbulent stack plumes with an imaging Fourier-transform spectrometer. vol. 7673, pp. 76730H–76730H–12.
- [128] TRINCAVELLI, M. Gas discrimination for mobile robots. *Künstliche Intelligenz* 25, 4 (2011), 351 – 354.
- [129] VALIEV, M., BYLASKA, E., GOVIND, N., KOWALSKI, K., STRAATSMA, T., DAM, H. V., WANG, D., NIEPLOCHA, J., APRA, E., WINDUS, T., AND DE JONG, W. Nwchem: A comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations. *Computer Physics Communications* 181, 9 (2010), 1477 – 1489.
- [130] VALLIÈRES, A., VILLEMAIRE, A., CHAMBERLAND, M., BELHUMEUR, L., FARLEY, V., GIROUX, J., AND LEGAULT, J.-F. Algorithms for chemical detection, identification and quantification for thermal hyperspectral imagers. vol. 5995, pp. 59950G–59950G–11.

- [131] VAPNIK, V. N. *The Nature of Statistical Learning Theory*. Springer-Verlag New York, Inc., New York, NY, USA, 1995.
- [132] VOLLMER, M., AND MÖLLMANN, K.-P. *Basic Properties of IR Imaging Systems*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010, pp. 73–155.
- [133] WAKEFIELD, J. *Multicollinearity*. John Wiley & Sons, Ltd, 2014.
- [134] WEHR, A., AND LOHR, U. Airborne laser scanning—an introduction and overview. *{ISPRS} Journal of Photogrammetry and Remote Sensing* 54, 2–3 (1999), 68 – 82.
- [135] WEIERSTRASS, K. Über die analytische darstellbarkeit sogenannter willkürlicher funktionen einer reellen. In 1885, 633 - 639 and 789 - 805.
- [136] WILEY, C. A. Synthetic aperture radars. *IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems* AES-21, 3 (May 1985), 440–443.
- [137] WORMHOUDT, J. *Infrared Methods for Gaseous Measurements*. Optical Science and Engineering. Taylor & Francis, 1985.
- [138] WYATT, C. L. *Electro-optical system design: For information processing*, 1991.
- [139] ZELLER, J. W., EFSTATHIADIS, H., BHOWMIK, G., HALDAR, P., DHAR, N. K., LEWIS, J., WIJEWARNASURIYA, P., PURI, Y. R., AND SOOD, A. K. Development of Ge PIN photodetectors on 300 mm si wafers for near-infrared sensing. *Int. J. Engr. Res. Tech* 8, 1 (2015), 23–33.
- [140] ZOHORA, S., KHAN, A., AND HUNDEWALE, N. Chemical Sensors Employed in Electronic Noses: A Review. In *Advances in Computing and Information Technology*, N. Meghanathan, D. Nagamalai, and N. Chaki, Eds., vol. 178 of *Advances in Intelligent Systems and Computing*. Springer Berlin Heidelberg, 2013, pp. 177–184.
- [141] ZUEV INSTITUTE OF ATMOSPHERIC OPTICS (IAO). HITRAN on the Web. <http://hitran.iao.ru/>. (Accessed on 10/06/2016).